



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Regularización, problemas inversos y derivadas fraccionarias

Alejandro Piedrahita Hincapie

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Escuela de Matemáticas
Medellín, Colombia
2016

Regularización, problemas inversos y derivadas fraccionarias

Alejandro Piedrahita Hincapie

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magíster en Ciencias Matemáticas Aplicadas

Director:
Ph.D., Carlos Enrique Mejía S.

Línea de Investigación:
Problemas inversos

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Escuela de Matemáticas
Medellín, Colombia
2016

As is inevitable when results proved generally are put to practice, some of the restrictions that were found to be useful in establishing the theory may be difficult, even impossible, to verify in practice. No good scientist, however, would let this prevent him from applying the theory. Indeed, applications of the theory are frequently made without such verification, and the results obtained often point the way to extensions and improvements of the previous theoretical foundations.

Keith B. Oldham, Jerome Spanier [57].

Agradecimientos

Un sincero agradecimiento al profesor Carlos Mejía por su orientación durante estos años en la Escuela de Matemáticas de la Universidad Nacional de Colombia, sede Medellín y en particular por el Seminario de Análisis Numérico que lideró el segundo semestre del 2015, con apoyo otorgado por la Facultad de Ciencias a través del Proyecto de Apoyo al Grupo de Investigación Computación Científica, código Hermes 32144. Las actividades realizadas en el seminario condujeron al planteamiento y solución del problema presentado en esta tesis.

Finalmente agradezco a mi esposa Yesenia, por su paciencia y apoyo incondicional durante estos años, igualmente a mis amigos Edwin, Alexander, Luis Fernando, Pedro, Jairo, Liliam, Natalia y de manera especial a Benjamín.

Resumen

En la primera parte de esta tesis nos referimos a problemas inversos, regularización y derivadas fraccionarias. Con respecto a los dos primeros temas, nos concentramos en problemas inversos de conducción de calor y regularización por los métodos de Tikhonov y molificación discreta. Estos temas sirven de introducción a la segunda parte de la tesis, en la que abordamos el estudio teórico y numérico de problemas inversos enunciados a partir de ecuaciones de difusión y ecuaciones de advección-dispersión que involucran derivadas temporales fraccionarias de Caputo. En la última parte de la tesis incluimos material original que logramos obtener para el estudio de un problema inverso unidimensional para una ecuación de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria. Demostramos que el problema inverso es mal condicionado y proponemos un esquema de diferencias finitas de marcha en el espacio, que utiliza molificación discreta como técnica de regularización. Incluimos estimativos de error y ejemplos numéricos ilustrativos.

Palabras clave: problemas mal condicionados, derivadas fraccionarias de Caputo, problemas inverso de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria, diferencias finitas, molificación.

Abstract

In the first part of this thesis we introduce inverse problems, regularization and fractional derivatives. With respect to the first two topics, we focus our attention on inverse heat conduction problems and regularization by the method of Tikhonov and the method of discrete mollification. These ideas are the first steps toward the second part of the thesis, in which we consider theoretical and numerical aspects of inverse problems based on diffusion equations and advection-dispersion equations involving Caputo's time partial fractional derivatives. In the last part of the thesis we include original material that we obtained for the study of a unidimensional inverse problem for an advection-dispersion equation with time fractional derivative of Caputo type. We show that the inverse problem is ill-posed and thus any numerical solution must include some regularization technique. Our approach is a finite difference space marching scheme enhanced by adaptive discrete mollification. Error estimates and illustrative numerical examples are provided.

Keywords: Ill-posed problems, Caputo fractional derivatives, time fractional inverse advection-dispersion problem, finite differences, mollification.

Contenido

Agradecimientos	vii
Resumen	ix
1. Introducción	2
2. Problemas inversos y regularización	5
2.1. Método de regularización de Tikhonov	5
2.2. Método de Molificación	9
2.2.1. Antecedentes teóricos	9
2.2.2. Molificación discreta	10
2.3. Problemas inversos de conducción de calor	11
2.3.1. Regularización de Tikhonov	13
2.3.2. Perturbación singular	15
2.3.3. Método de molificación	17
3. Derivadas fraccionarias	20
3.1. Derivadas fraccionarias y molificación	20
3.2. Ecuación de difusión con derivada temporal fraccionaria	22
3.3. Ecuación de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria	25
3.3.1. Problema de Cauchy	26
3.3.2. Problema con valores de frontera	27
4. Problema inverso de conducción de calor con derivada temporal fraccionaria	30
4.1. Planteamiento del problema	30
4.2. Algoritmo de marcha en el espacio molificado	32
4.3. Generación de datos para el algoritmo	33
4.4. Ejemplos numéricos	34
5. Problema inverso de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria	37
5.1. Planteamiento del problema	37
5.2. Algoritmo de marcha en el espacio molificado	40
5.3. Generación de datos para el algoritmo	44
5.4. Ejemplos numéricos	45

6. Conclusiones y trabajo futuro	50
6.1. Conclusiones	50
6.2. Trabajo futuro	50
Bibliografía	52

1 Introducción

Los problemas inversos (lineales) son modelos matemáticos usualmente enunciados por medio de ecuaciones del tipo $Kx = y$, donde K es un operador compacto, y se caracterizan por ser problemas mal condicionados en el sentido de no poseer una única solución x ó porque en el caso de tener una única solución, ésta no depende continuamente del dato y . El “ruido” presente en la medición de datos hace necesario que los problemas inversos sean “estabilizados” por medio de técnicas de regularización.

Los problemas inversos de conducción de calor (IHCP, por sus siglas en inglés) son otra clase importante de problemas inversos, con múltiples aplicaciones que van desde la determinación de constantes térmicas en procesos de congelación y enfriamiento, hasta la estimación del calentamiento aerodinámico de vehículos en túneles de viento [47]. Los problemas inversos de conducción de calor son problemas que se emplean para determinar temperaturas o flujos de calor en regiones fronterizas de un sólido conductor de calor, a partir de medidas de temperaturas y/o flujos de calor en el interior del sólido o en fronteras accesibles al mismo. Los problemas inversos de conducción de calor son problemas mal condicionados que exigen ser estabilizados por medio de técnicas de regularización. Entre las técnicas más efectivas se destaca la molificación discreta [1, 48], técnica que se ha ido afianzando como herramienta de regularización [8, 22, 23, 24, 25, 35, 37, 66] y también como mecanismo acelerador de esquemas explícitos para la solución numérica de algunas ecuaciones diferenciales [2, 49]. En esta tesis se consideran problemas inversos que por regla general son mal condicionados y en los que la molificación discreta ocupa un lugar destacado.

Las derivadas fraccionarias y las derivadas parciales fraccionarias han sido empleadas exitosamente en la solución numérica de problemas de mecánica de fluidos y del continuo [6, 38, 67], así como en la formulación de modelos matemáticos para fenómenos de viscoelasticidad [15, 61, 62]. Las derivadas fraccionarias en ecuaciones de difusión permiten modelar procesos que microscópicamente no corresponden a un movimiento aleatorio de partículas de tipo browniano, sino a un movimiento más general conocido con el nombre genérico de difusión anómala [14, 58, 59, 60, 70]. Aplicaciones a problemas de difusión incluyen el modelamiento de fenómenos de transporte en medios finitos y semi-infinitos [57]. Las ecuaciones de advección-dispersión con derivadas fraccionarias por su parte, surgen al extender de medios isotrópicos a medios heterogéneos, la primera ley de Fick y resultan adecuadas para modelar procesos de dispersión observados en ríos y otros medios naturales [13].

En esta tesis se estudian ecuaciones de difusión con derivada temporal fraccionaria (TFDE, por sus siglas en inglés) y ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria (TFADE, por sus siglas en inglés), en las que la derivada temporal es formulada en términos de la derivada fraccionaria de Caputo [14, 58]. Una gran variedad de métodos numéricos para resolver ecuaciones parciales fraccionarias se han desarrollado en la última década [3, 42, 43, 44, 52, 71, 73]. Entre los resultados de la tesis se incluye el esquema implícito en diferencias finitas propuesto en el capítulo 3, que aproxima la solución de un problema de valor inicial con condiciones de frontera, para una ecuación de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria y coeficientes constantes. Se trata de un esquema implícito que generaliza el esquema propuesto por Murio [52].

Una clase de problemas inversos de gran interés [51, 56] que involucra ecuaciones en derivadas fraccionarias, la constituyen los problemas inversos asociados a problemas de conducción de calor, en los que la derivada temporal que gobierna la ecuación es una derivada fraccionaria (TFIHCP, por sus siglas en inglés). De particular importancia resulta el trabajo desarrollado por Murio [53] para la aproximación de soluciones numéricas al TFIHCP unidimensional en una barra finita, que involucra la identificación simultánea de la temperatura y del flujo de calor en una de las fronteras de la barra.

Esta tesis tiene como objetivo extender el trabajo de Murio [51], con el fin de resolver problemas inversos asociados a ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria (TFIADP, por sus siglas en inglés). Los problemas directos (de valor inicial o valores de frontera) asociados a ecuaciones fraccionarias de advección-dispersión, han sido objeto de estudio en los últimos años [36, 26, 27, 32, 39, 16, 34, 11, 46, 46, 63]. Sin embargo, para problemas inversos asociados a ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria, los resultados recientes son escasos [79, 78, 77].

Debe advertirse que en esta tesis hay abundante material original: todas las rutinas computacionales fueron realizadas expresamente para esta tesis pero se advierte que hacen uso de las rutinas de Hansen [21] y de Acosta¹. El capítulo 5 es la principal contribución original de la tesis y parte de su contenido hace parte de un artículo en preparación que pronto se someterá a consideración de una revista.

La tesis está organizada de la siguiente manera. En el capítulo 2 se ilustran algunas de las ideas que sustentan los métodos de regularización para aproximar las soluciones de problemas inversos en general, incluyendo con particular énfasis el método de molificación discreta. Las técnicas de regularización descritas se presentan con ejemplos numéricos ilustrativos empleados para estabilizar problemas inversos de conducción de calor. En el capítulo 3 se hace una

¹Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Matemática y Estadística, Manizales, Colombia.

revisión de la noción de derivada fraccionaria de Caputo y su interpretación como problema mal condicionado que exige ser regularizado cuando los datos no se conocen con exactitud. Tras una breve introducción de los diferentes tipos de ecuaciones fraccionarias a considerar, el interés se centra en el estudio de algunos esquemas de diferencias finitas, con el fin de aproximar las soluciones de los problemas directos que se necesitan para generar los datos requeridos por los problemas inversos que involucran derivadas fraccionarias. En el capítulo 4 se estudia el problema inverso de conducción de calor con derivada temporal fraccionaria TFIHCP y se presentan los resultados numéricos obtenidos al implementar el algoritmo de marcha en el espacio molificado, propuesto por Murio para su solución [53]. En el capítulo 5 se plantea el problema inverso de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria TFIADP, que involucra la reconstrucción simultánea de la concentración de soluto y del flujo de dispersión en una de las fronteras del dominio físico. Se propone un algoritmo de marcha en el espacio que utiliza molificación discreta como técnica de regularización. El capítulo concluye con una demostración de convergencia formal del método y ejemplos numéricos de interés que ilustran la estabilidad y precisión del algoritmo propuesto.

2 Problemas inversos y regularización

En este capítulo se introduce el marco teórico a partir del cual se desarrolla este trabajo. Se trata de una serie de resultados que se presentan como consecuencia de la revisión bibliográfica realizada durante la elaboración de esta tesis. Los resultados enunciados en la sección 2.1 hacen parte de la teoría clásica de regularización [18, 19, 20, 29]. En la sección 2.2 se introduce la noción de molificación discreta y sus propiedades, siguiendo de cerca el trabajo desarrollado por Acosta y Mejía [2]. El capítulo finaliza con ejemplos numéricos de interés que ilustran la efectividad de las técnicas de regularización para estabilizar problemas inversos de conducción de calor.

2.1. Método de regularización de Tikhonov

Los problemas inversos considerados en esta sección involucran ecuaciones del tipo

$$Kx = y \tag{2-1}$$

donde $K : X \rightarrow Y$ es un operador entre espacios normados. En general, bajo estas condiciones, (2-1) no es un problema *bien condicionado* en el sentido que no es posible garantizar que la ecuación (2-1) posea solución única x (el operador inverso $K^{-1} : Y \rightarrow X$ existe) y que además, en el caso de que dicha solución exista, dependa continuamente del dato y (el operador inverso $K^{-1} : Y \rightarrow X$ es acotado).

En el método de regularización de Tikhonov, $K : H_1 \rightarrow H_2$ es un operador compacto entre espacios de Hilbert H_1 y H_2 . En lugar de esperar entonces que la ecuación (2-1) posea una solución, sólo requerimos que exista al menos una “solución” $x \in H_1$ tal que

$$\|Kx - y\|_{H_2} = \inf\{\|Ku - y\|_{H_2} \mid u \in H_1\}. \tag{2-2}$$

A cualquier vector $x \in H_1$ que satisfaga (2-2) se le denomina *solución en mínimos cuadrados* de (2-1). El siguiente resultado proporciona una caracterización de las soluciones en mínimos cuadrados [19, Teorema 1.3.1].

Teorema 2.1.1. *Sea $K : H_1 \rightarrow H_2$ un operador compacto entre espacios de Hilbert H_1 y H_2 . Las siguientes condiciones son equivalentes:*

1. $\|Kx - y\|_{H_2} = \inf\{\|Ku - y\|_{H_2} \mid u \in H_1\},$

$$2. K^*Kx = K^*y,$$

$$3. Kx = Py,$$

donde $K^* : H_2 \rightarrow H_1$ es el operador adjunto de K y P es la proyección ortogonal de H_2 sobre $\overline{R(K)}$.

Por las condiciones enunciadas en el teorema (2.1.1) y por la continuidad de K y de K^* , el conjunto de las soluciones en mínimos cuadrados de (2-1) es un conjunto convexo y cerrado, y posee por tanto [64, Teorema 4.10] un único elemento de norma mínima que se denota por $K^\dagger y$. El operador K^\dagger definido en el subespacio denso $D(K^\dagger) = R(K) + R(K)^\perp$ de esta forma se denomina *inversa generalizada* de Moore-Penrose de K .

Observación 2.1.1. Si el operador K es invertible, entonces $K^\dagger = K^{-1}$.

Por el teorema (2.1.1), una condición necesaria y suficiente para que x sea una *solución en mínimos cuadrados* de (2-1) es

$$K^*Kx = K^*y, \tag{2-3}$$

donde $K^*K : H_1 \rightarrow H_1$ es un operador compacto y autoadjunto con autovalores no negativos $\lambda_j \geq 0$. A las raíces cuadradas $\mu_j := \sqrt{\lambda_j}$ de los autovalores de K^*K se les denomina *valores singulares* de K [29, Definición A.52]. Los valores singulares proporcionan una representación conveniente para la inversa generalizada de Moore-Penrose de K [29, Teorema A.54].

Teorema 2.1.2. Sea $K : H_1 \rightarrow H_2$ un operador compacto entre espacios de Hilbert con valores singulares $\mu_1 \geq \mu_2 \cdots > 0$, ordenados de acuerdo a su multiplicidad. Si $y \in D(K^\dagger)$, entonces existen sistemas ortonormales $\{x_j\} \subset H_1$ y $\{y_j\} \subset H_2$ tales que

$$K^\dagger y = \sum_j \frac{\langle y, y_j \rangle_{H_2}}{\mu_j} x_j. \tag{2-4}$$

Observación 2.1.2.

1. Bajo las condiciones del teorema 2.1.2,

$$x = \sum_j \frac{\langle y, y_j \rangle_{H_2}}{\mu_j} x_j$$

es la solución en mínimos cuadrados de $Kx = y$ que tiene norma mínima.

2. La representación (2-4) de K^\dagger muestra que K^\dagger no es acotada en dimensión infinita.

La estrategia empleada para hallar una solución en mínimos cuadrados de $Kx = y$ ó equivalentemente una solución de $K^*Kx = K^*y$, consiste en considerar el problema “perturbado”

$$(K^*K + \alpha I) x_\alpha = K^*y, \quad (2-5)$$

donde $I : H_1 \rightarrow H_1$ es el operador identidad y $\alpha > 0$. El operador perturbado $K^*K + \alpha I$ es un operador biyectivo [29, Theorem 2.11], con inversa $(K^*K + \alpha I)^{-1} : H_2 \rightarrow H_1$ acotada como consecuencia del teorema de la aplicación abierta [9, Corolario 2.7] y por tanto el problema (2-5) es un problema bien condicionado. La ecuación (2-5) es la *forma regularizada* de (2-3) y su única solución

$$x_\alpha = (K^*K + \alpha I)^{-1} K^*y, \quad (2-6)$$

recibe el nombre de *aproximación de Tikhonov* para $K^\dagger y$. De esta forma es posible obtener una familia de operadores acotados $R_\alpha := (K^*K + \alpha I)^{-1} K^*$ que “aproxima” al operador (no acotado en la práctica) K^\dagger como se indica a continuación [19, p. 86].

Teorema 2.1.3. *Sea $K : H_1 \rightarrow H_2$ un operador compacto entre espacios de Hilbert H_1 y H_2 . Si $x = K^\dagger y$ y x_α es la aproximación de Tikhonov (2-6), entonces*

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \|x_\alpha - x\|_{H_1} = 0.$$

El dato y es una cantidad observada que en la práctica se desconoce con exactitud y sólo se dispone del dato perturbado y^δ que satisface el estimativo de error $\|y - y^\delta\| < \delta$, para algún $\delta > 0$. Por tanto, en lugar de (2-6) se tiene la aproximación regularizada

$$x_\alpha^\delta = (K^*K + \alpha I)^{-1} K^*y^\delta, \quad (2-7)$$

que satisface el estimativo de error [19, p. 87],

$$\|x_\alpha - x_\alpha^\delta\| < \delta / \sqrt{\alpha}.$$

Para un $\delta > 0$ fijo, la cota de error “explota” cuando $\alpha \rightarrow 0$, evidenciando la inestabilidad del problema subyacente. Elegir el parámetro de regularización α que dependa del error δ de manera adecuada es entonces importante. La estrategia de Tikhonov consiste en elegir $\alpha = \alpha(\delta)$ de manera tal que

$$\alpha(\delta) \rightarrow 0 \quad \text{y} \quad x_{\alpha(\delta)}^\delta \rightarrow K^\dagger y \quad \text{cuando} \quad \delta \rightarrow 0,$$

como por ejemplo cuando $\alpha = \alpha(\delta)$ se elige de manera tal que $\delta^2/\alpha(\delta) \rightarrow 0$ cuando $\delta \rightarrow 0$.

En el método de Tikhonov el parámetro de regularización $\alpha = \alpha(\delta)$ se elige a priori, es decir, antes de que se calcule la solución aproximada x_α^δ . Sin embargo, Morozov observó que una elección *a posteriori* del parámetro de regularización α , basada en cálculos reales de

x_α^δ , podría arrojar resultados más efectivos en la práctica. El *principio de discrepancia* de Morozov consiste en seleccionar un parámetro de regularización $\alpha = \alpha(\delta)$ de manera tal que $\|Kx_\alpha^\delta - y^\delta\| = \delta$.

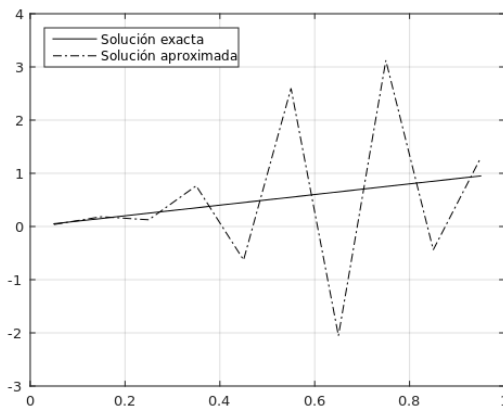
A continuación se ilustran las técnicas de regularización presentadas, por medio del problema clásico de Fox-Goodwin [7, p. 665]. El problema consiste en aproximar la solución de la ecuación integral de primera clase

$$\int_0^1 \sqrt{s^2 + t^2} f(t) dt = \frac{1}{3} \left[(1 + s^2)^{3/2} - s^3 \right]. \quad (2-8)$$

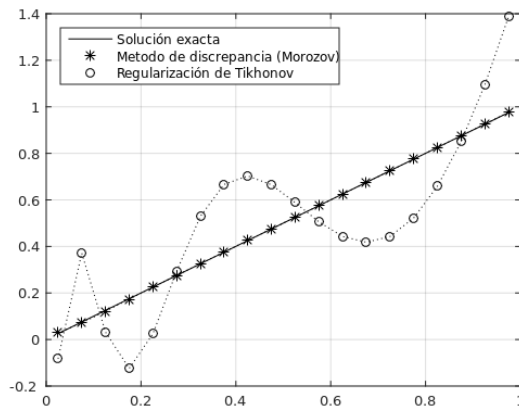
que tiene como solución exacta a $f(t) = t$. Al aproximar la integral por medio de una fórmula de cuadratura de punto medio, se obtiene el sistema de ecuaciones lineales

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sqrt{t_i^2 + t_j^2} x_j = b_i, \quad i = 1, \dots, n$$

donde $t_j = (2j - 1)/(2n)$, $b_i = \frac{1}{3} \left[(1 + t_i^2)^{3/2} - t_i^3 \right]$ y $x_j \approx f(t_j)$ con $i, j = 1, \dots, n$ o también $Kx = b$, donde $K = [k_{ij}]$ es la matriz $n \times n$ definida por $k_{ij} = (t_i^2 + t_j^2)^{1/2}$. Algunos resultados obtenidos por medio de MATLAB 8.5, R2015a, se ilustran a continuación. El mal condicionamiento del problema se mide por medio del número de condición $\kappa(K)$ en la norma 2 (el cociente entre el mayor y el menor de los valores singulares de K). Cuando $\kappa(K)$ es próximo a 1, los cambios relativos en x están controlados por los cambios relativos en b al ser casi de la misma magnitud. Cuando $\kappa(K) \gg 1$ el mal condicionamiento del problema se refleja en la sensibilidad de la solución de $Kx = b$ a pequeños cambios del dato b .



(a) Solución de $Kx = b$ para $n = 10$



(b) $n = 20$, $\alpha = 2.5 \times 10^{-9}$ y $\delta = 10^{-4}$

Figura 2-1: Soluciones aproximadas para el problema de Fox-Goodwin.

En la figura (2-1a), $\kappa(K) = 1.94517 \times 10^{10}$ (el sistema lineal hereda el mal condicionamiento del problema original). En la figura (2-1b), $\kappa(K) = 5.69258 \times 10^{17}$. La solución de Tikhonov

fue obtenida por medio de (2-7), donde $\kappa(K^*K + \alpha I) = 2.62828 \times 10^8$. Para la solución del principio de Morozov, empleamos las rutinas desarrolladas por Hansen [21], que se basan en la descomposición en valores singulares compacta (Compact SVD) de la matriz K .

2.2. Método de Molificación

La molificación es una técnica que ha demostrado ser efectiva para la regularización de problemas mal condicionados. El método fue inicialmente introducido por Paolo Manselli y Keith Miller en 1980, pero fue Diego A. Murio quien continuó con su desarrollo.

2.2.1. Antecedentes teóricos

Sean $p > 0, \delta > 0$ y $A_p = \left(\int_{-p}^p \exp(-s^2) ds \right)^{-1}$. La función

$$\kappa_{\delta,p}(t) = \begin{cases} \frac{A_p}{\delta} \exp\left(-\frac{t^2}{\delta}\right), & |t| < p\delta, \\ 0, & |t| \geq p\delta, \end{cases} \quad (2-9)$$

se denomina *núcleo gaussiano truncado* y A_p es una constante elegida de manera tal que $\int_{-p\delta}^{p\delta} \kappa_{\delta,p}(t) dt = 1$. El núcleo gaussiano truncado $\kappa_{\delta,p}$ es una función no negativa $C^\infty(-p\delta, p\delta)$ que se anula por fuera de $(-p\delta, p\delta)$.

Sean $I := [0, 1]$ e $I_\delta := [p\delta, 1 - p\delta]$. El intervalo I_δ es no vacío siempre que $p < 1/(2\delta)$. Para una función f integrable en I , definimos su δ -molificación $J_\delta f$ como

$$J_\delta f(t) := \int_0^1 \kappa_\delta(t-s) f(s) ds \quad (2-10)$$

donde la p -dependencia en el núcleo ha sido suprimida por simplicidad en la notación.

La δ -molificación de una función integrable satisface los estimativos de consistencia y estabilidad a continuación enunciados [41, Lemas 2.1 y 2.2].

Lema 2.2.1 (Consistencia).

1. Si f es Lipschitz en I , entonces existe una constante C (que no depende de δ) tal que

$$\|J_\delta f - f\|_{\infty, I_\delta} \leq C\delta.$$

2. Si $f \in C^2(I)$, entonces existe una constante C (que no depende de δ) tal que

$$\|(J_\delta f)' - f'\|_{\infty, I_\delta} \leq C\delta.$$

Lema 2.2.2 (Estabilidad). Sean f y f^ε funciones integrables en I tales que $\|f - f^\varepsilon\|_{\infty, I} \leq \varepsilon$ para algún $\varepsilon > 0$. Entonces existe una constante C (que no depende de δ) tal que

$$\|J_\delta f - J_\delta f^\varepsilon\|_{\infty, I_\delta} \leq \varepsilon \quad y \quad \|(J_\delta f)' - (J_\delta f^\varepsilon)'\|_{\infty, I_\delta} \leq C \frac{\varepsilon}{\delta}.$$

2.2.2. Molificación discreta

El método de molificación discreta [2, 49] consiste en reemplazar un conjunto de datos $y = \{y_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$, que puede consistir de evaluaciones de una función $y = y(t)$ en puntos equidistantes $t_j = t_0 + j\Delta t$, $\Delta t > 0$, $j \in \mathbb{Z}$ de la recta, por su versión molificada $J_\eta y$, donde J_η es el *operador de molificación discreta* definido por

$$[J_\eta y]_j := \sum_{i=-\eta}^{\eta} w_i y_{j-i}, \quad j \in \mathbb{Z},$$

donde los pesos w_i satisfacen las condiciones $w_i = w_{-i}$ y $0 \leq w_i \leq w_{i-1}$ para $i = 1, \dots, \eta$ junto con

$$\sum_{i=-\eta}^{\eta} w_i = 1.$$

Una manera de obtener los pesos de molificación w_i se describe a continuación. Sean $\delta > 0$, $\Delta t > 0$ y $p > 0$. Se define el parámetro η como el único entero no negativo tal que

$$(\eta - 1/2) \Delta t < p\delta \leq (\eta + 1/2) \Delta t$$

y así

$$\eta = \left\lceil \frac{p\delta}{\Delta t} - \frac{1}{2} \right\rceil, \quad (2-11)$$

donde $\lceil \cdot \rceil$ denota la función parte entera superior. Los pesos se obtienen por integración numérica del núcleo Gaussiano truncado (2-9), como

$$w_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \kappa_{\delta,p}(-s) ds$$

donde

$$t_j = (j - 1/2) \Delta t, \quad j \in \mathbb{Z}.$$

El parámetro δ se denomina *parámetro de molificación* y determina la forma del núcleo gaussiano truncado. Los pesos de molificación w_i elegidos de esta forma también se pueden expresar como

$$w_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \kappa_{\delta,p}(-s) ds = A_p \delta^{-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \exp\left(-\frac{s^2}{\delta^2}\right) ds = A_p \int_{t_i/\delta}^{t_{i+1}/\delta} \exp(-s^2) ds,$$

donde

$$\frac{t_i}{\delta} = p \frac{(i - 1/2) \Delta t}{(\eta + 1/2) \Delta t} = p \frac{(i - 1/2)}{(\eta + 1/2)}$$

y dependen así de p y η . Algunos pesos son ilustrados en la tabla **2-1**.

η	w_0	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5
1	8.4272e-1	7.8640e-2				
2	6.0387e-1	1.9262e-1	5.4438e-3			
3	4.5556e-1	2.3772e-1	3.3291e-2	1.2099e-3		
4	3.6266e-1	2.4003e-1	6.9440e-2	8.7275e-3	4.7268e-4	
5	3.0028e-1	2.2625e-1	9.6723e-2	2.3430e-2	3.2095e-3	2.4798e-4

Tabla 2-1: Pesos de molificación para $p = 3$.

Observación 2.2.1. *La molificación discreta es un operador que requiere η valores a izquierda y a derecha de cada punto. Si los datos a molificar corresponden a evaluaciones de una función definida en $I = [0, 1]$, entonces a menos que algún tipo de extensión a izquierda de 0 y a derecha de 1 sea establecido, los únicos puntos en los cuales la molificación discreta puede ser calculada es en los puntos del intervalo $I_\delta = [p\delta, 1 - p\delta]$. Acosta y Mejía [1] presentan algunas extensiones útiles para datos por fuera del intervalo I_δ . En esta tesis sin embargo, los estimativos utilizados aplican sólo a puntos interiores del intervalo I_δ y todas las molificaciones se aplican respecto a la variable temporal.*

Algunos estimativos de estabilidad y consistencia [40, Teorema 2.1] y [41, Lema 2.4] para la molificación discreta son los siguientes.

Teorema 2.2.1. *Sea g una función con valores en \mathbb{R} , acotada y lo suficientemente suave, y G su versión discreta definida en T . Si G^ε es otra función discreta definida en T tal que*

$$|G^\varepsilon(t_j) - G(t_j)| \leq \varepsilon \quad \text{para } t_j \in T,$$

entonces existe una constante $C > 0$, independiente de δ , tal que

$$\begin{aligned} |J_\eta G^\varepsilon(t_j) - J_\eta G(t_j)| &\leq \varepsilon, \\ |J_\eta G(t_j) - g(t_j)| &\leq C(\delta + \Delta t) \end{aligned}$$

y también

$$\|(J_\eta g^\varepsilon)' - (J_\eta g)'\|_{\infty, I_\delta} \leq 2A_p \frac{\varepsilon}{\delta}.$$

2.3. Problemas inversos de conducción de calor

El primer problema inverso de conducción de calor IHCP considerado tiene lugar en un dominio espacial unidimensional semi-infinito y consiste en la reconstrucción de la temperatura en la frontera $x = 0$ del dominio, a partir de mediciones de temperaturas en el interior $x = 1$ del sólido conductor de calor.

Formalmente el problema a resolver es

$$u_{xx} = u_t, \quad x \geq 0, \quad t > 0, \quad (2-12)$$

$$u(1, t) = F(t), \quad t \geq 0, \text{ dato}, \quad (2-13)$$

$$u(x, 0) = 0, \quad x \geq 0, \quad (2-14)$$

$$u(0, t) = f(t), \quad t \geq 0, \text{ incógnita}, \quad (2-15)$$

$$u(x, t) \text{ acotada cuando } x \rightarrow \infty, \quad t > 0, \quad (2-16)$$

donde $u(x, t)$ representa la temperatura, x la distancia medida desde el origen (frontera) y t el tiempo. El objetivo es estimar la temperatura $f(t)$ en la frontera, conociendo como dato la temperatura interior $F(t)$.

Se trata de un problema mal condicionado como el siguiente análisis muestra. Suponemos que todas las funciones involucradas están en $L^2(\mathbb{R})$, extendiéndolas a toda la recta $-\infty < t < \infty$ de manera tal que sean cero para $t < 0$. Tomando la transformada de Fourier de la ecuación (2-12) respecto a la variable temporal, obtenemos

$$\widehat{u}_{xx}(x, \omega) = i\omega \widehat{u}(x, \omega), \quad 0 < x < \infty, \quad -\infty < \omega < \infty,$$

cuya solución general viene dada por

$$\widehat{u}(x, \omega) = A(\omega)e^{\sqrt{\frac{|\omega|}{2}}(1-i\sigma)x} + B(\omega)e^{-\sqrt{\frac{|\omega|}{2}}(1-i\sigma)x},$$

donde $\sigma = \text{sgn}(\omega)$. Empleando las condiciones (2-15) y (2-16),

$$\widehat{u}(x, \omega) = \widehat{f}(\omega)e^{-\sqrt{\frac{|\omega|}{2}}(1-i\sigma)x}$$

Finalmente, a partir de la condición (2-13),

$$\widehat{f}(\omega) = \widehat{F}(\omega)e^{\sqrt{\frac{|\omega|}{2}}(1-i\sigma)x}. \quad (2-17)$$

En la expresión anterior

$$\left| e^{\sqrt{\frac{|\omega|}{2}}(1-i\sigma)x} \right| = e^{\sqrt{\frac{|\omega|}{2}}x} \rightarrow \infty \quad \text{cuando } |\omega| \rightarrow \infty$$

y como $\widehat{f} \in L^2(\mathbb{R})$, \widehat{F} necesariamente debe decaer rápidamente cuando $\omega \rightarrow \infty$. Sin embargo, el dato $F \in L^2(\mathbb{R})$ del problema no se conoce con exactitud, sino una perturbación F^ε del mismo que satisface el estimativo de error $\|F - F^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} < \varepsilon$ y de la que sólo se sabe que está en $L^2(\mathbb{R})$, pero que en general no posee una propiedad de decaimiento rápido. Como $\|F^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|\widehat{F}^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})}$, \widehat{F}^ε tampoco va a decaer rápidamente cuando $\omega \rightarrow \infty$ y es por esto que cualquier perturbación en las componentes de altas frecuencias de \widehat{F} será amplificada

por un factor de $e^{\sqrt{\frac{|\omega|}{2}}x}$. Se concluye entonces que el IHCP es un problema mal condicionado que debe ser estabilizado.

El segundo problema inverso de conducción de calor IHCP considerado tiene lugar en una barra conductora de calor. Se trata también de un problema mal condicionado [48, p. 74], que involucra la reconstrucción de la temperatura y del flujo de calor en la extremo $x = 0$ de la barra, a partir de mediciones en el extremo $x = 1$. Formalmente el problema a resolver es

$$\begin{aligned} u_{xx} &= u_t, & 0 < x < 1, & t > 0, \\ u(1, t) &= F(t), & t > 0, & \text{dato}, \\ u_x(1, t) &= Q(t), & t > 0, & \text{dato}, \\ u(x, 0) &= 0, & 0 \leq x \leq 1, \\ u(0, t) &= f(t), & t > 0, & \text{incógnita}, \\ u_x(0, t) &= q(t), & t > 0, & \text{incógnita}. \end{aligned} \tag{2-18}$$

2.3.1. Regularización de Tikhonov

El problema directo

$$\begin{aligned} u_{xx} &= u_t, & x > 0, & t > 0, \\ u(x, 0) &= 0, & x > 0, \\ u(0, t) &= f(t), & t > 0, \end{aligned} \tag{2-19}$$

tiene como solución exacta [74, p. 273] a

$$u(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{1}{(t-s)^{3/2}} e^{\frac{-x^2}{4(t-s)}} f(s) ds \tag{2-20}$$

y por tanto el problema inverso (2-12)-(2-16) se puede expresar como una ecuación integral de Volterra de primera clase,

$$Kf = F, \quad \text{con} \quad (Kf)(t) := \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{1}{(t-s)^{3/2}} e^{\frac{-1}{4(t-s)}} f(s) ds. \tag{2-21}$$

K es un operador compacto en $L^p([0, T])$ con inversa no acotada [10, Lema 1], por lo que una pequeña perturbación F^δ del dato termina generando un enorme error en la aproximación de la solución f . La solución del problema inverso aquí presentada emplea las técnicas de regularización descritas en la sección (2.1). Como problema de prueba se considera el dato

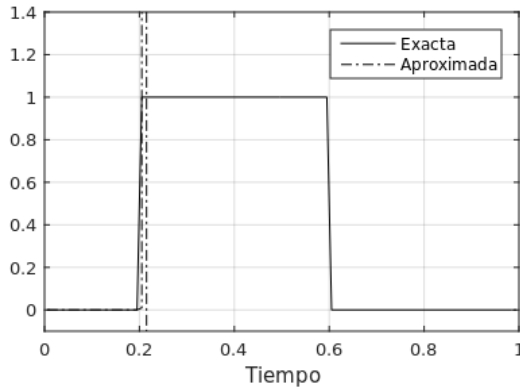
$$F(t) := \phi(1, t - 0.2) - \phi(1, t - 0.6), \quad \phi(x, t) := \begin{cases} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right) & \text{si } t > 0, \\ 0 & \text{si } t \leq 0, \end{cases} \tag{2-22}$$

donde $\operatorname{erfc}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$ es la función de error complementaria. Para este caso la solución exacta del problema inverso viene dada por

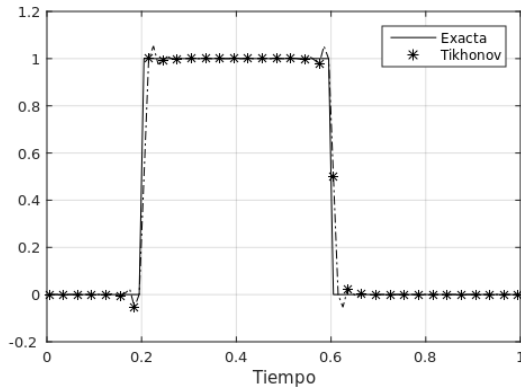
$$f(t) := \begin{cases} 1, & \text{si } 0.2 \leq t \leq 0.6, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2-23)$$

El dato F fue obtenido resolviendo el problema directo (2-19) por medio de (2-20), con f dada por (2-23). Se trata de un problema de prueba en el que la temperatura en la frontera f presenta un aumento y una caída severamente abrupta.

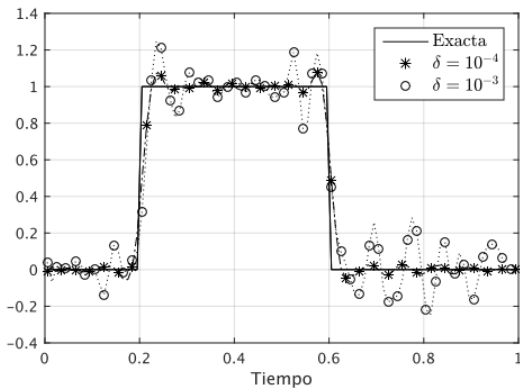
Al discretizar la ecuación integral (2-21) por medio de una fórmula de cuadratura de punto medio [21, p. 72], se obtiene un sistema lineal $n \times n$ mal condicionado $Ax = b$, donde $x_i \approx f(t_i)$ y $b_i = F(t_i)$. Para $n = 100$ por ejemplo, $\kappa(A) = 6.8705 \times 10^{36}$.



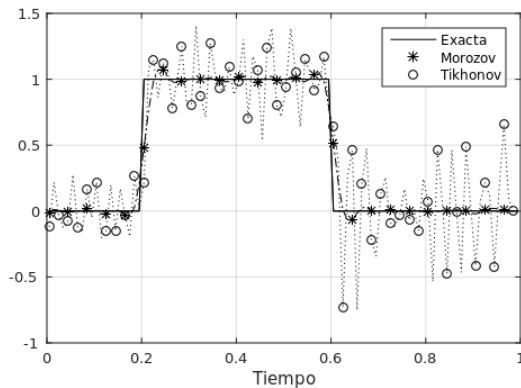
(a) Solución directa de $Ax = b$



(b) Tikhonov (2-6) con $\alpha = 10^{-6}$



(c) Tikhonov (2-7) con $\alpha = 10^{-6}$



(d) $\alpha = 2.5 \times 10^{-9}$ y $\delta = 10^{-4}$

Figura 2-2: Aproximación del problema inverso (2-12)-(2-16) con $n = 100$.

Los resultados de la figura (2-2a) ilustran el mal condicionamiento heredado del problema original (2-21). En las figuras (2-2b) y (2-2c), $\kappa(A^*A + \alpha I) = 126777$. En la figura (2-2d),

$\kappa(A^*A + \alpha I) = 5.07102$. Los resultados para el principio de discrepancia de Morozov fueron obtenidos empleando las rutinas desarrolladas por Hansen [21] y se basan en la descomposición en valores singulares compacta (Compact SVD) de la matriz A .

2.3.2. Perturbación singular

Esta técnica, también conocida como método intermedio [48], consiste en sustituir el problema inverso (2-12)-(2-16) por el problema perturbado

$$\begin{aligned} u_{xx} &= u_t - \gamma^2 u_{ttx}, \quad x > 0, \quad t > 0, \\ u(1, t) &= F^\varepsilon(t), \quad t > 0, \text{ dato}, \\ u(x, 0) &= 0, \quad x \geq 0, \\ u(0, t) &= f_\gamma^\varepsilon(t), \quad t > 0, \text{ incógnita}, \\ u(x, t) &\text{ acotada cuando } x \rightarrow \infty, \quad t > 0, \\ u(x, t) &\text{ acotada cuando } t \rightarrow \infty, \quad x > 0, \end{aligned} \tag{2-24}$$

donde $\gamma \ll 1$ es una constante no negativa tal que γ^2 puede interpretarse como un parámetro de relajación temporal y F^ε es un dato perturbado que satisface el estimativo de error $\|F - F^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \varepsilon$. El problema (2-24) es un problema estable respecto a perturbaciones en los datos y consistente con (2-12)-(2-16) [48, Teorema 3.3].

Teorema 2.3.1. *Sea $\varepsilon > 0$ y F^ε tal que $\|F - F^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \varepsilon$.*

1. (Estabilidad) *El problema (2-24) es estable respecto a perturbaciones en los datos:*

$$\|f_\gamma - f_\gamma^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \varepsilon \cdot e^{\frac{1}{2}\gamma^{-2/3}}.$$

2. (Consistencia) *La solución f_γ satisface el estimativo de error*

$$\|f - f_\gamma\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq (\gamma + 2\gamma^{1/2}) M,$$

$$\text{para } f \text{ tal que } f' \in L^2(\mathbb{R}) \text{ con } \max\{\|f\|_{L^2(\mathbb{R})}, \|f'\|_{L^2(\mathbb{R})}\} \leq M.$$

Murio [48, p. 84] propone un esquema de marcha en el espacio para resolver el problema (2-24). Sean M y N enteros positivos y $\Delta x = h = \frac{1}{M}$ y $\Delta t = k = \frac{1}{N}$ los parámetros de discretización. Para cada $m \in \{0, \dots, M\}$ y cada $n \in \{0, \dots, N\}$, la expresión U_m^n denota a la aproximación de $u(mh, nk)$. La ecuación diferencial parcial $u_{xx} = u_t - \gamma^2 u_{ttx}$ se aproxima por medio del esquema de diferencias finitas consistente

$$\frac{U_{m+1}^n - 2U_m^n + U_{m-1}^n}{h^2} = \frac{U_m^{n+1} - U_m^{n-1}}{2k} - \gamma^2 \frac{U_{m+1}^{n+1} - 2U_{m+1}^n + U_{m+1}^{n-1} + U_m^{n+1} - U_m^{n-1} + 2U_m^n - U_m^{n-1}}{k^2 h} \tag{2-25}$$

para $m = M, M-1, \dots, 1$ y $n = 1, 2, \dots, N$. Esta aproximación conduce al esquema de marcha en el espacio

$$\begin{aligned}
 U_{m-1}^n &:= \frac{h^2}{2k} (U_m^{n+1} + U_m^{n-1}) - \frac{\gamma^2}{k^2 h} (U_{m+1}^{n+1} - 2U_{m+1}^n + U_{m+1}^{n-1} - U_m^{n+1} + 2U_m^n - U_m^{n-1}) \\
 &\quad - U_m^{n+1} + 2U_m^n, \quad m = M, M-1, \dots, 1, \quad n = 1, 2, \dots, N-M+m-1, \\
 U_M^n &:= F^\varepsilon(nk), \quad n = 1, 2, \dots, N \\
 U_{M-1}^n &:= G^\varepsilon(nk), \quad n = 1, 2, \dots, N \\
 U_m^0 &:= 0, \quad m = 0, 1, \dots, M.
 \end{aligned} \tag{2-26}$$

Además del dato F en $x = 1$, el algoritmo requiere un dato adicional G en $x = 1-h$, lo que es consecuente con el hecho de que $u_{xx} = u_t - \gamma^2 u_{ttx}$ es considerada como una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden por el algoritmo de marcha en el espacio. Después de marchar en el espacio con este esquema de diferencias finitas, la solución U_0^n , $n = 1, \dots, N-M$ es aceptada como el valor aproximado para la temperatura f en la frontera $x = 0$. Este esquema es condicionalmente estable bajo las condiciones enunciadas en el siguiente teorema [54, Sección 4].

Teorema 2.3.2 (Estabilidad). *El esquema de marcha en el espacio (2-26) es condicionalmente estable si $h = k = 2\gamma^2$.*

Como problema de prueba se considera nuevamente el dato $F(t) := \phi(1, t-0.2) - \phi(1, t-0.6)$ empleado en la sección 2.3.1. Para G se utiliza $G(t) := \phi(1-h, t-0.2) - \phi(1-h, t-0.6)$.

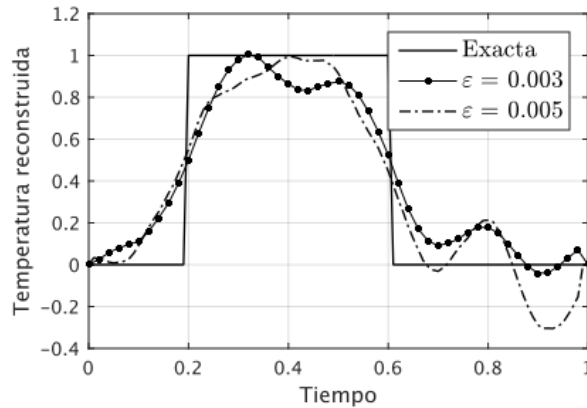


Figura 2-3: Temperatura reconstruida f_γ^ε en la frontera con $h = k = 0.01$ y $\gamma = \sqrt{h/2}$.

La implementación del esquema la realizamos en MATLAB 8.5, R2015a. Las perturbaciones para los datos se simulan por medio de números aleatorios que distribuyen uniformemente en $[-\varepsilon, \varepsilon]$.

Los errores para la aproximación de la temperatura en la frontera $x = 0$ son medidos por el valor cuadrático medio

$$\left(\frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N |U_0^n - f(t_n)|^2 \right)^{1/2}.$$

En la figura (2-3), para $\varepsilon = 0.003$ el error (absoluto) cometido en la aproximación es 0.190438 y para $\varepsilon = 0.005$ es 0.17749.

2.3.3. Método de molificación

Ilustramos la técnica resolviendo el problema inverso (2-18). En el método de molificación [48], en lugar de estimar la temperatura f y el flujo de calor q en la frontera, lo que se busca es estimar la temperatura molificada $J_\delta f := \rho_\delta * f$ y el flujo de calor molificado $J_\delta q := \rho_\delta * q$. El problema inverso (2-18) se sustituye entonces por

$$\begin{aligned} J_\delta u_{xx} &= (J_\delta u)_t, & 0 < x < 1, & t > 0, \\ J_\delta u(1, t) &= J_\delta F^\varepsilon(t), & t > 0, & \text{dato}, \\ J_\delta u_x(1, t) &= J_\delta Q^\varepsilon(t), & t > 0, & \text{dato}, \\ J_\delta u(x, 0) &= 0, & 0 \leq x \leq 1, \\ J_\delta u(0, t) &= J_\delta f^\varepsilon(t), & t > 0, & \text{incógnita}, \\ J_\delta u_x(0, t) &= J_\delta q^\varepsilon(t), & t > 0, & \text{incógnita}, \end{aligned} \tag{2-27}$$

donde $J_\delta F^\varepsilon$ y $J_\delta Q^\varepsilon$ son datos perturbados que satisfacen los estimativos de error $\|J_\delta F - J_\delta F^\varepsilon\| < \varepsilon$ y $\|J_\delta Q - J_\delta Q^\varepsilon\| < \varepsilon$, para algún $\varepsilon > 0$. El problema (2-27) es un problema estable respecto a perturbaciones en los datos y consistente con (2-18) [48, Teorema 3.4].

Teorema 2.3.3. *Sea $\varepsilon > 0$ y F^ε tal que $\|F - F^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \varepsilon$. Para f tal que $\|f'\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq M$,*

1. *El problema molificado es estable respecto a perturbaciones en los datos:*

$$\|J_\delta f - J_\delta f^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \varepsilon e^{(2\delta)^{-2/3}} \quad y \quad \|J_\delta q - J_\delta q^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq 2\varepsilon e^{(2\delta)^{-2/3}},$$

2. *La solución del problema molificado satisface los estimativos de error*

$$\|f - J_\delta f^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \frac{1}{2}M\delta + \varepsilon e^{(2\delta)^{-2/3}} \quad y \quad \|q - J_\delta q^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \frac{1}{2}M\delta + 2\varepsilon e^{(2\delta)^{-2/3}}.$$

Murio [48, p. 79] propone un esquema de marcha en el espacio para resolver el problema inverso (2-27). El método se basa en introducir las nuevas variables $v := J_\delta u$ y $w := \partial v / \partial x$ con el propósito de escribir el problema inverso (2-27) de la forma equivalente

$$\begin{aligned}
\frac{\partial w}{\partial x} &= \frac{\partial v}{\partial t}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\
w &= \frac{\partial v}{\partial x}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\
v(1, t) &= J_\delta F^\varepsilon(t), \quad t > 0, \quad \text{dato}, \\
w(1, t) &= J_\delta Q^\varepsilon(t), \quad t > 0, \quad \text{dato}, \\
v(x, 0) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \\
v(0, t) &= J_\delta f^\varepsilon(t), \quad t > 0, \quad \text{incógnita}, \\
w(0, t) &= J_\delta q^\varepsilon(t), \quad t > 0, \quad \text{incógnita}.
\end{aligned} \tag{2-28}$$

La descripción del esquema es la siguiente. Sean M y N enteros positivos y $\Delta x = h = \frac{1}{M}$ y $\Delta t = k = \frac{1}{N}$ los parámetros de discretización. Para cada $m \in \{0, \dots, M\}$ y cada $n \in \{0, \dots, N\}$, las expresiones V_m^n y W_m^n denotan las aproximaciones para $v(x_m, t_n)$ y $w(x_m, t_n)$ respectivamente, donde $x_m := mh$ y $t_n := kn$. El método consiste en aproximar las ecuaciones diferenciales parciales $\partial w / \partial x = \partial v / \partial t$ y $w = \partial v / \partial x$ en (2-28), por medio del esquema de diferencias finitas consistente

$$\frac{W_m^n - W_{m-1}^n}{h} = \frac{V_m^{n+1} - V_m^{n-1}}{2k} \quad \text{y} \quad W_m^n = \frac{V_m^n - V_{m-1}^n}{h} \tag{2-29}$$

para $m = M, M-1, \dots, 1$ y $n = 1, 2, \dots, N-1$. Esta aproximación conduce al esquema de marcha en el espacio

$$\begin{aligned}
W_{m-1}^n &:= W_m^n - \frac{h}{2k} (V_m^{n+1} - V_m^{n-1}), \\
V_{m-1}^n &:= V_m^n - h W_{m-1}^n, \quad m = M, M-1, \dots, 1, \quad n = 1, 2, \dots, N-M+m-1, \\
V_M^n &:= F^\varepsilon(nk), \quad n = 1, 2, \dots, N \\
W_M^n &:= Q^\varepsilon(nk), \quad n = 1, 2, \dots, N \\
V_m^0 &:= 0, \quad m = 0, 1, \dots, M.
\end{aligned} \tag{2-30}$$

Una vez se realiza la marcha en el espacio con este esquema de diferencias finitas, las aproximaciones V_0^n y W_0^n , $n = 1, \dots, N-M$, son aceptadas como los valores molificados para la temperatura $J_\delta f$ y el flujo de calor $J_\delta q$ en la frontera $x = 0$. Este esquema es estable y consistente con la versión regularizada del problema original [55, Sección 3].

Teorema 2.3.4. *El esquema de diferencias finitas de marcha en el espacio (2-30) es un esquema consistente e incondicionalmente estable y por tanto converge a la solución del problema molificado (2-27).*

La aproximación de los datos molificados $[J_\delta F^\varepsilon(t_1), \dots, J_\delta F^\varepsilon(t_n)]$ y $[J_\delta Q^\varepsilon(t_1), \dots, J_\delta Q^\varepsilon(t_n)]$ a partir de los datos perturbados $[F^\varepsilon(t_1), \dots, F^\varepsilon(t_n)]$ y $[Q^\varepsilon(t_1), \dots, Q^\varepsilon(t_n)]$ respectivamente, se realiza por medio del operador de molificación discreta J_η introducido en la sección (2.2.2). Para la elección del parámetro de molificación δ que determina a η (ver ecuación (2-11)), la solución aquí presentada¹ utiliza el principio de validación cruzada [49] para determinar automáticamente el parámetro de molificación, dependiendo de la cantidad de ruido presente en los datos.

Como problema de prueba se considera nuevamente el dato $F(t) := \phi(1, t-0.2) - \phi(1, t-0.6)$ empleado en la sección (2.3.1). Q se aproxima por medio de $Q(t_n) = (V_M^n - V_{M-1}^n)/h + O(h)$. Los errores para la aproximación de la temperatura en la frontera $x = 0$ son medidos por el valor cuadrático medio

$$\left(\frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N |V_0^n - f(t_n)|^2 \right)^{1/2}.$$

La implementación del esquema la realizamos en MATLAB 8.5, R2015a. Las perturbaciones para los datos se simulan por medio de números aleatorios que distribuyen uniformemente en $[-\varepsilon, \varepsilon]$. Para la molificación de los datos utilizamos las rutinas desarrolladas por Carlos D. Acosta². Algunos de los resultados obtenidos se ilustran a continuación. Para $\varepsilon = 0.003$ el error (absoluto) cometido en la aproximación es 0.136824 y para $\varepsilon = 0.005$ es 0.152395.

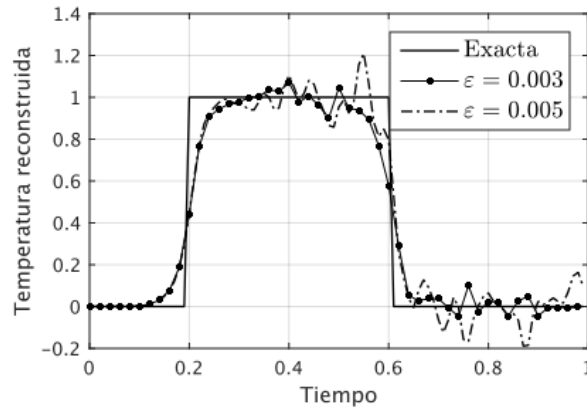


Figura 2-4: Temperatura reconstruida $J_\delta f^\varepsilon$ en la frontera.

Los problemas inversos de conducción de calor IHCP presentados en este capítulo, con sus respectivas soluciones numéricas, son problemas unidimensionales que pueden ser extendidos a dominios espaciales bidimensionales [48, Capítulo 4] o a situaciones en las que la derivada temporal del modelo difusivo es reemplazada por una derivada fraccionaria, como se describe en el capítulo 4 de esta tesis.

¹La elección del parámetro de molificación empleada por Murio [55] es $\delta = O(k)$.

²Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Matemática y Estadística, Manizales, Colombia.

3 Derivadas fraccionarias

El cálculo fraccionario es a menudo considerado una rama del análisis matemático que se ocupa del estudio de ecuaciones integro-diferenciales, en las que las integrales involucradas son de tipo convolutivo, con núcleos débilmente singulares. En este capítulo se presentan las nociones del cálculo fraccionario empleadas para la elaboración de esta tesis. En la sección 3.1 se introduce la *derivada fraccionaria* de Caputo y algunas de sus propiedades [58, 50, 14, 2, 31]. Las secciones 3.2 y 3.3 están destinadas al estudio de soluciones numéricas de ecuaciones de difusión y ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria, respectivamente.

3.1. Derivadas fraccionarias y molificación

La derivada fraccionaria (izquierda) de Caputo de orden α , $0 < \alpha \leq 1$, de una función f diferenciable en $[0, T]$ se define como

$$D^{(\alpha)}f(t) := \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{f'(s)}{(t-s)^\alpha} ds, & 0 \leq t \leq T, \quad 0 < \alpha < 1, \\ \frac{df}{dx}(x), & 0 \leq t \leq T, \quad \alpha = 1. \end{cases} \quad (3-1)$$

El concepto general de derivada fraccionaria de Caputo abarca el caso de derivadas fraccionarias de orden $\alpha > 1$. La noción aquí presentada es consecuente con uno de los objetivos de estudio de esta tesis, a saber, las ecuaciones de difusión y las ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria de orden $0 < \alpha \leq 1$.

La derivada de Caputo $D^{(\alpha)}$ es un operador bien definido [14, Teorema 3.1 y Lema 3.11].

Proposición 3.1.1. *Si f es una función absolutamente continua en $[0, T]$, entonces la derivada fraccionaria de Caputo $D^{(\alpha)}f(t)$ existe casi en toda parte.*

Proposición 3.1.2. *Si $f \in C^1([0, T])$, entonces $D^{(\alpha)}f \in C([0, T])$ y $D^{(\alpha)}(0) = 0$.*

La derivada fraccionaria de Caputo de una función constante es la función constante cero y para las funciones $f(t) := t$ y $g(t) := t^2$ por ejemplo, sus derivadas de Caputo son

$$D^{(\alpha)}f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{t^{1-\alpha}}{1-\alpha} \quad \text{y} \quad D^{(\alpha)}g(t) = \frac{\Gamma(3)}{\Gamma(3-\alpha)} t^{2-\alpha}.$$

Algunas reglas del cálculo fraccionario [14, Teoremas 3.16 y 3.17] son las siguientes.

Proposición 3.1.3. Sean $f_1, f_2 : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ tales que $D^{(\alpha)}f_1$ y $D^{(\alpha)}f_2$ existen casi en toda parte y sean $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$. Entonces $D^{(\alpha)}(c_1f_1 + c_2f_2)$ existe en casi toda parte y

$$D^{(\alpha)}(c_1f_1 + c_2f_2) = c_1D^{(\alpha)}f_1 + c_2D^{(\alpha)}f_2.$$

Proposición 3.1.4 (Fórmula de Leibniz). Sean f y g funciones analíticas en $(-h, h)$, para algún $h > 0$. Entonces

$$D^{(\alpha)}[fg](t) = \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} g(0)(f(t) - f(0)) + (D^{(\alpha)}g(t)) f(t) + \sum_{k=1}^{\infty} \binom{\alpha}{k} (J^{k-\alpha}g(t)) D^{(\alpha)}f(t),$$

donde J^α es el operador integral fraccionario de Riemann-Liouville definido en $L^1([0, T])$ por

$$J^\alpha f(t) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} f(s) ds.$$

Una propiedad muy útil [31, p. 17] que es posible extender para derivadas de orden fraccionario es la transformada de Fourier de una derivada ordinaria: si $n \in \mathbb{N}$ y $f \in C^n(\mathbb{R})$ es tal que $f^{(k)}(t) \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \pm\infty$, para $k = 0, \dots, n-1$, entonces $\widehat{f^{(n)}}(\omega) = (i\omega)^n \widehat{f}(\omega)$.

Teorema 3.1.1. Sea $f \in C^1([0, T])$ una función que se extiende a todo \mathbb{R} de manera tal que sea cero por fuera de $[0, T]$. Entonces

$$\widehat{D^{(\alpha)}f}(\omega) = (i\omega)^\alpha \widehat{f}(\omega).$$

Las ecuaciones que involucran al operador diferencial de Caputo $D^{(\alpha)}$ son casos particulares de ecuaciones integrales de primera clase. Por lo general, los problemas mal condicionados se reducen a ecuaciones integrales de primera clase [20, 30] y es por esto que el cálculo de derivadas fraccionarias en general, requiere de algún tipo de regularización cuando no se conocen los datos con absoluta exactitud. En los siguientes capítulos se ilustran dos problemas inversos mal condicionados que involucran derivadas fraccionarias.

Cuando es necesario determinar la derivada fraccionaria de Caputo de orden α ,

$$D^{(\alpha)}g(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{g'(s)}{(t-s)^\alpha} ds, \quad 0 \leq t \leq T, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (3-2)$$

a partir de una versión perturbada g^ε del dato exacto g , en lugar de obtener $D^{(\alpha)}g^\varepsilon$, se busca una solución molificada $J_\delta(D^{(\alpha)}g^\varepsilon)$. Extendiendo g a todo \mathbb{R} de manera tal que sea cero por fuera de $[0, T]$, (3-2) se convierte en una ecuación integral de tipo convolutivo que se puede expresar como

$$D^{(\alpha)}g = K * g'$$

donde K es el núcleo

$$K(t) := \begin{cases} \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}, & t > 0, \\ 0, & t \leq 0. \end{cases}$$

De esta forma

$$J_\delta (D^{(\alpha)} g^\varepsilon) = D^{(\alpha)} g^\varepsilon * \kappa_\delta = K * (g^\varepsilon * \kappa_\delta)' = K * (J_\delta g^\varepsilon)',$$

y por tanto

$$J_\delta (D^{(\alpha)} g^\varepsilon) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{(J_\delta g^\varepsilon)'(s)}{(t-s)^\alpha} ds. \quad (3-3)$$

El error al aproximar a $D^{(\alpha)} g^\varepsilon$ por (3-3) satisface [50, Teorema 2.1] el siguiente estimativo.

Teorema 3.1.2. *Si g' y g^ε son funciones Lipschitz en I tales que $\|g - g^\varepsilon\|_{\infty, I} \leq \varepsilon$, entonces existe una constante positiva C , independiente de δ , tal que*

$$\|J_\delta (D^{(\alpha)} g^\varepsilon) - D^{(\alpha)} g\|_{\infty, I} \leq \frac{C}{(1-\alpha)\Gamma(1-\alpha)} \left(\delta + \frac{\varepsilon}{\delta} \right).$$

Por medio de una fórmula de cuadratura es posible obtener una aproximación discreta para la derivada fraccionaria de Caputo [52].

Lema 3.1.1. *Sea g una función continuamente diferenciable y k un entero positivo. Entonces el operador*

$$(C^{(\alpha)} g)(t) := \sigma_{\alpha, k} \sum_{i=1}^{\lfloor t/k \rfloor} \omega_i^{(\alpha)} \{g(t - ik + 1) - g(t - ik)\}, \quad (3-4)$$

donde $\lfloor \cdot \rfloor$ denota la función parte entera inferior,

$$\sigma_{\alpha, k} := \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{1}{1-\alpha} \frac{1}{k^\alpha} \quad y \quad \omega_i^{(\alpha)} := i^{1-\alpha} - (i-1)^{1-\alpha}, \quad (3-5)$$

satisface la aproximación de primer orden

$$D^{(\alpha)} g(t) = C^{(\alpha)} g(t) + O(k). \quad (3-6)$$

3.2. Ecuación de difusión con derivada temporal fraccionaria

Cuando una derivada fraccionaria reemplaza a una derivada parcial temporal de primer orden en un modelo difusivo lineal, se obtiene la ecuación de difusión fraccionaria temporal (TFDE)

$$D_t^{(\alpha)} u(x, t) = u_{xx}(x, t),$$

donde $D_t^{(\alpha)}u$ denota la derivada fraccionaria temporal de Caputo

$$D_t^{(\alpha)}u(x, t) := \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\partial u}{\partial t}(x, s) (t-s)^{-\alpha} ds, & 0 < \alpha < 1, \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, t), & \alpha = 1. \end{cases} \quad (3-7)$$

Para las ecuaciones diferenciales parciales con derivadas fraccionarias (FPDE, por sus siglas en inglés), en general no existen soluciones exactas o fórmulas cerradas y es por esto que se hace necesario utilizar esquemas numéricos.

Para el caso de las TFDE, algunas soluciones analíticas han sido propuestas. Mainardi *et al.* [17] estudian soluciones fundamentales (funciones de Green) por medio de las transformadas de Laplace y de Fourier. Wyss [72] plantea una solución empleando funciones de Fox. Huan *et al.* [27] estudian problemas de valor inicial y valores de frontera, en todo el espacio y en el semiespacio, obteniendo soluciones fundamentales en términos de funciones de Fox. Agrawal [4] considera el problema con condición inicial acotada y condiciones de frontera de Dirichlet nulas,

$$\begin{aligned} D_t^{(\alpha)}u(x, t) &= u_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\ u(0, t) &= 0, \quad t > 0, \\ u(1, t) &= 0, \quad t > 0, \\ u(x, 0) &= f(x), \quad 0 < x < 1, \end{aligned} \quad (3-8)$$

y obtiene la solución analítica

$$u(x, t) := 2 \sum_{n=0}^{\infty} E_{\alpha}(-\pi^2 n^2 t^{\alpha}) \sin n\pi x \int_0^1 f(r) \sin n\pi r dr, \quad (3-9)$$

donde

$$E_{\alpha}(z) := \sum_{m=0}^{\infty} \frac{z^m}{\Gamma(\alpha m + 1)}$$

es la función de Mittag-Leffler. Debido a la lenta convergencia de la serie $E_{\alpha}(z)$ para valores de z “grandes”, no resulta práctico utilizar (3-9) para calcular la solución exacta de (3-8) para tiempos muy grandes.

Desde una perspectiva numérica, una variedad de métodos de diferencias finitas han sido desarrollados para las TFDE [80, 73, 52, 75, 69, 76, 5, 68]. Uno de los objetivos de esta tesis es el estudio del esquema implícito de diferencias finitas propuesto por Murio [52] para obtener soluciones aproximadas al problema directo (3-8). La descripción del esquema se

presenta a continuación.

Sean M y N enteros positivos y $\Delta x = h = \frac{1}{M}$ y $\Delta t = k = \frac{T}{N}$ los parámetros de discretización. Para cada $m \in \{0, \dots, M\}$ y cada $n \in \{0, \dots, N\}$, sea u_m^n la aproximación para $u(x_m, t_k)$, donde $x_m = mh$ y $t_n = nk$. Empleando el lema (3.1.1) para aproximar la derivada de Caputo, la ecuación $D_t^{(\alpha)} u = u_{xx}$ se aproxima por medio del esquema de diferencias finitas consistente

$$\sigma_{\alpha,k} \sum_{j=1}^n \omega_j^{(\alpha)} (u_m^{n-j+1} - u_m^{n-j}) = \frac{1}{h^2} (u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n) \quad (3-10)$$

para $m = 1, \dots, M-1$ y $n = 1, \dots, N$. Fijando $\gamma := \frac{1}{h^2}$ y teniendo en cuenta que $\omega_1^{(\alpha)} = 1$, a partir de (3-10), Murio obtiene el método de diferencias finitas implícito

$$-\gamma u_{m-1}^n + (\sigma_{\alpha,k} + 2\gamma) u_m^n - \gamma u_{m+1}^n = \sigma_{\alpha,k} u_m^{n-1} - \sigma_{\alpha,k} \sum_{j=2}^n \omega_j^{(\alpha)} (u_m^{n-j+1} - u_m^{n-j}), \quad (3-11)$$

$$m = 1, \dots, M-1, \quad n = 1, \dots, N.$$

Para los nodos internos ($m = 1, 2, \dots, M-1$), el esquema propuesto viene dado para $n = 1$ por

$$-\gamma u_{m-1}^1 + (\sigma_{\alpha,k} + 2\gamma) u_m^1 - \gamma u_{m+1}^1 = \sigma_{\alpha,k} u_m^0$$

y para $n = 2, \dots, N$ por

$$-\gamma u_{m-1}^n + (\sigma_{\alpha,k} + 2\gamma) u_m^n - \gamma u_{m+1}^n = \sigma_{\alpha,k} u_m^{n-1} - \sigma_{\alpha,k} \sum_{j=2}^n \omega_j^{(\alpha)} (u_m^{n-j+1} - u_m^{n-j}),$$

con condiciones de frontera

$$u_0^n = u_M^n = 0, \quad n = 1, \dots, N$$

y condición inicial

$$u_m^0 = f(x_m), \quad m = 0, \dots, M,$$

donde $\sigma_{\alpha,k}$ y $\omega_j^{(\alpha)}$ vienen dadas por (3-5). La convergencia del esquema [52, Teorema 2.1] se enuncia a continuación.

Teorema 3.2.1. *El esquema de diferencias finitas implícito (3-11) es un esquema incondicionalmente estable y consistente con (3-8).*

La implementación del esquema la realizamos en MATLAB 8.5, R2015a. Algunos de los resultados obtenidos se ilustran a continuación.

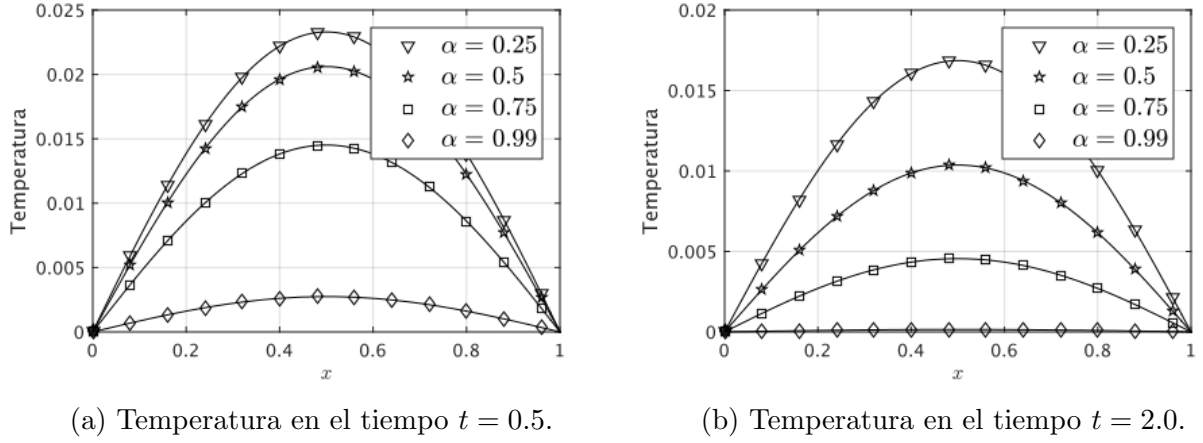


Figura 3-1: Resultados para $f(x) = x(1 - x)$, $\Delta x = 0.01$ y $\Delta t = 1/256$.

Observación 3.2.1. La implementación del esquema de diferencias finitas (3-11), permite resolver los problemas directos que se necesitan para generar los datos requeridos por los problemas inversos asociados a ecuaciones de difusión con derivada temporal fraccionaria.

3.3. Ecuación de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria

La ecuación de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria (TFADE), viene dada por

$$D_t^{(\alpha)} u(x, t) + au_x(x, t) = du_{xx}(x, t),$$

donde $D_t^{(\alpha)} u$ denota la derivada fraccionaria temporal de Caputo (3-7), $a > 0$ es la constante de convección y $d > 0$ es la constante de difusión.

Algunos problemas directos (de valor inicial y/o de valores de frontera) para el caso de las TFADE, han sido objeto de estudio en los últimos años. Liu *et al.* [32] obtienen una solución analítica para un problema de valor inicial en el semiespacio, por medio de las transformadas de Mellin y de Laplace. Huang *et al.* [27] proponen soluciones para el semiespacio y para un dominio espacial acotado. Salim *et al.* [65] obtienen una solución analítica para una TFDAE con término reactivo, haciendo uso de la relación que existe entre las transformadas de Fourier y de Mellin.

Con relación a la solución numérica de problemas directos para las TFDAE, algunos esquemas de diferencias finitas han sido propuestos [33, 78, 28, 45, 12, 3].

3.3.1. Problema de Cauchy

Acosta *et al.* [3] proponen un esquema de diferencias finitas explícito y conservativo para el problema de Cauchy

$$\begin{aligned} D_t^{(\alpha)} u(x, t) + cu_x(x, t) &= A(u)_{xx}(x, t) + f(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \end{aligned} \quad (3-12)$$

donde c es una constante positiva y $A(u)$ es el *coeficiente de difusión integrado*

$$A(u) := \int_0^u a(s) ds, \quad a(u) \geq 0, \quad a \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R}).$$

La descripción del esquema es la siguiente. Sean M y N enteros positivos y $\Delta x = h = \frac{1}{M}$ y $\Delta t = k = \frac{T}{N}$ los parámetros de discretización. Para cada $m \in \mathbb{Z}$ y cada $n \in \{0, \dots, N\}$, sea u_m^n la aproximación para $u(x_m, t_k)$, donde $x_m = mh$ y $t_n = nk$. Empleando el lema (3.1.1) para aproximar la derivada de Caputo y las aproximaciones para las derivadas parciales espaciales

$$\begin{aligned} u_x(x_m, t_n) &= \frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} + O(h), \\ A_{xx}(u(x_m, t_n)) &= \frac{A(u_{m+1}^n) - 2A(u_m^n) + A(u_{m-1}^n)}{h^2} + O(h^2), \end{aligned} \quad (3-13)$$

se obtiene el esquema explícito de diferencias finitas

$$\sigma_{\alpha, k} \sum_{j=1}^n \omega_j^{(\alpha)} (u_m^{n-j+1} - u_m^{n-j}) + c \frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} = \frac{1}{h^2} (A(u_{m+1}^n) - 2A(u_m^n) + A(u_{m-1}^n)) \quad (3-14)$$

para $m \in \mathbb{Z}$ y $n = 1, \dots, N$. Haciendo $\lambda := \frac{1}{\sigma_{\alpha, k} h}$, $\mu := \frac{\lambda}{h}$ y $A_m^n := A(u_m^n)$, el esquema se puede escribir para $n = 0$ como

$$u_m^1 = u_m^0 - c\lambda (u_m^0 - u_{m-1}^0) + \mu (A_{m+1}^0 - 2A_m^0 + A_{m-1}^0), \quad m \in \mathbb{Z}$$

y para $n = 1, \dots, N$ como

$$\begin{aligned} u_m^{n+1} &= u_m^n - c\lambda (u_m^n - u_{m-1}^n) + \mu (A_{m+1}^n - 2A_m^n + A_{m-1}^n) \\ &\quad - \sum_{j=1}^n \omega_j^{(\alpha)} (u_m^{n-j+1} - u_m^{n-j}), \quad m \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

Algunas propiedades del esquema [3, Teoremas 1 y 2] son las siguientes.

Teorema 3.3.1. *Si la condición CFL*

$$c\lambda + 2\mu\|a\|_\infty \leq 2 - 2^{1-\alpha}$$

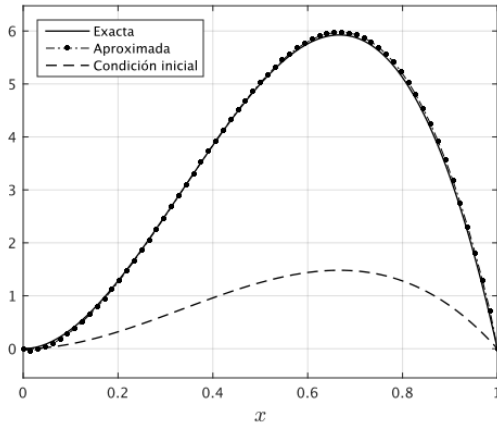
se satisface, entonces el esquema de diferencias finitas (3-14) para el problema de Cauchy (3-12) con término fuente nulo:

1. Es monótono y
2. Satisface las siguientes cotas de estabilidad:

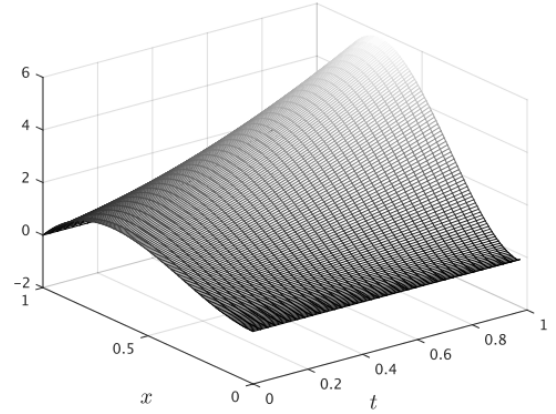
$$\|u^n\|_\infty \leq \|u^0\|_\infty \quad y \quad \|u^n\|_1 \leq \|u^0\|_1$$

para $n = 1, 2, \dots, N$.

Algunos resultados obtenidos, para el problema de Cauchy con solución exacta $u(x, t) = 10x^2(1-x)(t+1)^2$, se ilustran a continuación. La implementación del esquema la realizamos en MATLAB 8.5, R2015a.



(a) Solución en el tiempo $t = 1$.



(b) Superficie de la solución aproximada.

Figura 3-2: Resultados para $c = 0$, $a(u) = 0.001$, $\alpha = 2/3$, $h = 1/128$ y $k = 0.027$.

Observación 3.3.1. La implementación del esquema de diferencias finitas (3-14), permite resolver los problemas directos que se necesitan para generar los datos requeridos por los problemas inversos asociados a ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria.

3.3.2. Problema con valores de frontera

En esta sección proponemos un esquema de diferencias finitas para resolver numéricamente el problema directo

$$\begin{aligned} D_t^{(\alpha)} u(x, t) + au_x(x, t) &= du_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\ u(0, t) &= u_l(t), \quad t > 0, \\ u(1, t) &= u_r(t), \quad t > 0, \\ u(x, 0) &= f(x), \quad 0 < x < 1. \end{aligned} \tag{3-15}$$

Se trata de un esquema implícito que generaliza el esquema propuesto por Murio [52] para resolver el problema (3-8) y que coincide con el esquema empleado por Zheng *et al.* [78], cuando la condición de frontera derecha del problema (3-15) es nula ($u_r(t) = 0$). La descripción del esquema es la siguiente.

Sean M y N enteros positivos y $\Delta x = h = \frac{1}{M}$ y $\Delta t = k = \frac{T}{N}$ los parámetros de discretización. Para cada $m \in \{0, \dots, M\}$ y cada $n \in \{0, \dots, N\}$, sea u_m^n la aproximación para $u(x_m, t_k)$, donde $x_m = mh$ y $t_n = nk$. Empleando el lema (3.1.1) para aproximar la derivada de Caputo, la ecuación $D_t^{(\alpha)} u + au_x = du_{xx}$ se aproxima por medio del esquema de diferencias finitas consistente,

$$\sigma_{\alpha,k} \sum_{j=1}^n \omega_j^{(\alpha)} (u_m^{n-j+1} - u_m^{n-j}) + a \frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} = d \frac{u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n}{h^2} \quad (3-16)$$

para $m = 1, \dots, M-1$ y $n = 1, \dots, N$. De esta forma, para los nodos internos ($m = 1, 2, \dots, M-1$), el esquema propuesto viene dado para $n = 1$ por

$$-\left(\frac{d}{h^2} + \frac{a}{2h}\right) u_{m-1}^1 + \left(\sigma_{\alpha,k} + \frac{2d}{h^2}\right) u_m^1 - \left(\frac{d}{h^2} - \frac{a}{2h}\right) u_{m+1}^1 = \sigma_{\alpha,k} v_m^0,$$

y para $n = 2, \dots, N$ por

$$\begin{aligned} -\left(\frac{d}{h^2} + \frac{a}{2h}\right) u_{m-1}^n + \left(\sigma_{\alpha,k} + \frac{2d}{h^2}\right) u_m^n - \left(\frac{d}{h^2} - \frac{a}{2h}\right) u_{m+1}^n \\ = \sigma_{\alpha,k} v_m^{n-1} - \sigma_{\alpha,k} \sum_{j=2}^n \omega_j^{(\alpha)} (u_m^{n-j+1} - u_m^{n-j}), \end{aligned}$$

con condiciones de frontera

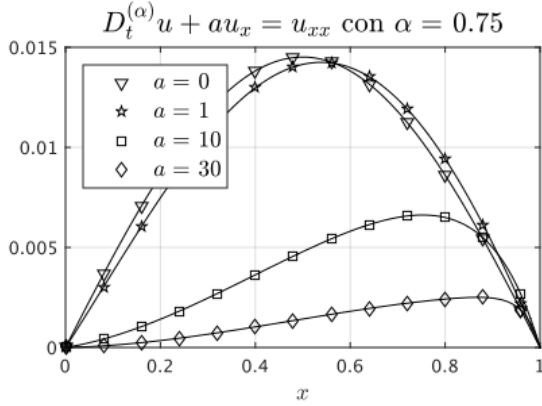
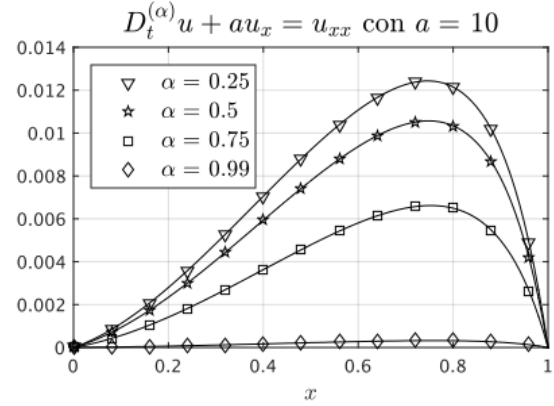
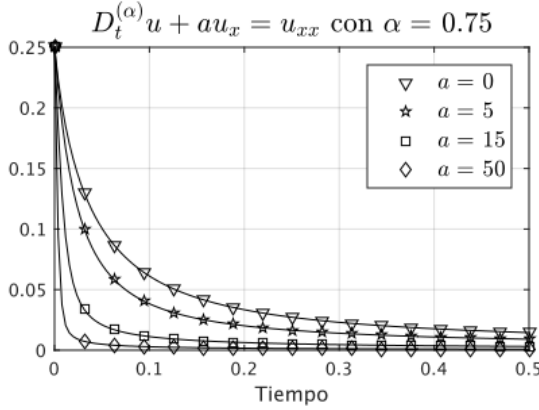
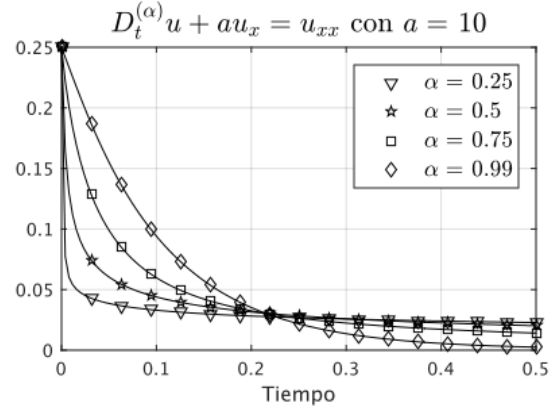
$$u_0^n = u_l(t_n), \quad u_M^n = u_r(t_n), \quad n = 1, \dots, N$$

y condición inicial

$$u_m^0 = f(x_m), \quad m = 0, \dots, M,$$

donde $\sigma_{\alpha,k}$ y $\omega_j^{(\alpha)}$ vienen dadas por (3-5).

La implementación del esquema la realizamos en MATLAB 8.5, R2015a. Algunos de los resultados obtenidos se ilustran a continuación.

(a) Solución en el tiempo $t = 0.5$.(b) Solución en el tiempo $t = 0.5$.(c) Solución en $x = 0.5$ (d) Solución en $x = 0.5$.**Figura 3-3:** Resultados para $f(x) = x(1 - x)$, $u_l(x) = u_r(x) = 0$, $h = 1/100$ y $k = 1/256$.

Observación 3.3.2. La implementación del esquema de diferencias finitas (3-16), permite resolver los problemas directos que se necesitan para generar los datos requeridos por los problemas inversos asociados a ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria.

Las nociones introducidas en este capítulo permiten estudiar fenómenos no locales con memoria, en los que la velocidad de difusión resulta ser incompatible con el modelo clásico de movimiento browniano [51] y fundamentan las ideas presentadas a continuación en los capítulos 4 y 5 de esta tesis.

4 Problema inverso de conducción de calor con derivada temporal fraccionaria

En este capítulo se considera la solución propuesta por Murio a un problema inverso de conducción de calor con derivada temporal fraccionaria TFIHCP, en una barra conductora de calor [51]. El problema involucra la determinación de la temperatura y del flujo de calor en uno de los extremos de la barra, a partir de mediciones de datos perturbados en el otro extremo. La solución presentada muestra la efectividad de las técnicas de molificación para estabilizar problemas inversos de conducción de calor con derivada temporal fraccionaria.

4.1. Planteamiento del problema

Los problemas inversos de conducción de calor con derivada temporal fraccionaria TFIHCP, son generalizaciones de los problemas inversos de conducción de calor IHCP que surgen cuando la derivada parcial temporal del modelo difusivo es reemplazada por una derivada temporal fraccionaria.

El TFIHCP a considerar viene dado por

$$\begin{aligned} D_t^{(\alpha)} u(x, t) &= u_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < 1, \\ u(0, t) &= \tau(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{dato}, \\ u_x(0, t) &= \sigma(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{dato}, \\ u(1, t) &= \xi(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{incógnita}, \\ u_x(1, t) &= \beta(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{incógnita}, \\ u(x, 0) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \end{aligned} \tag{4-1}$$

donde $D_t^{(\alpha)} u$ denota la derivada fraccionaria temporal de Caputo (3-7) y las funciones τ y σ no se conocen con exactitud, sino datos perturbados τ^ε y σ^ε que satisfacen los estimativos de error $\|\tau - \tau^\varepsilon\|_\infty < \varepsilon$ y $\|\sigma - \sigma^\varepsilon\|_\infty < \varepsilon$ para algún $\varepsilon > 0$. El objetivo es determinar la temperatura ξ y el flujo de calor β en el extremo derecho $x = 1$ de la barra, a partir mediciones de la temperatura τ y el flujo de calor σ realizadas en el extremo izquierdo $x = 0$ de

la barra.

El TFIHCP (4-1) es un problema mal condicionado en el dominio de las frecuencias como a continuación demostramos. Para esto suponemos que todas las funciones involucradas están en $L^2(\mathbb{R})$, extendiéndolas a toda la recta $-\infty < t < \infty$ de manera tal que sean cero para $t < 0$. Al tomar la transformada de Fourier en $D_t^{(\alpha)} u = u_{xx}$ respecto a la variable temporal (ver teorema (3.1.1)), se obtiene la ecuación diferencial ordinaria

$$(i\omega)^\alpha \hat{u}(x, \omega) = \hat{u}_{xx}(x, \omega), \quad 0 < x < 1, \quad -\infty < \omega < \infty, \quad (4-2)$$

donde $(i\omega)^\alpha = |\omega|^\alpha e^{i\varsigma\pi\alpha/2}$, con $\varsigma := \text{sgn}(\omega)$. La solución general de (4-2) viene dada por

$$\hat{u}(x, \omega) = Ae^{k_1 x} + Be^{k_2 x}, \quad (4-3)$$

donde k_1 y k_2 son las dos raíces cuadradas complejas del número complejo $(i\omega)^\alpha$, esto es,

$$k_1 := |\omega|^{\alpha/2} \left(\cos \frac{\pi\alpha}{4} + i \sin \frac{\varsigma\pi\alpha}{4} \right) \quad y \quad k_2 := -k_1$$

y por consiguiente la solución general (4-3) se puede escribir como

$$\hat{u}(x, \omega) = A \exp \left(|\omega|^{\alpha/2} \left[\cos \frac{\pi\alpha}{4} + i \sin \frac{\varsigma\pi\alpha}{4} \right] x \right) + B \exp \left(-|\omega|^{\alpha/2} \left[\cos \frac{\pi\alpha}{4} + i \sin \frac{\varsigma\pi\alpha}{4} \right] \right).$$

Haciendo $\mu := |\omega|^{\alpha/2}$ y $\nu := \cos \frac{\pi\alpha}{4} + i \sin \frac{\varsigma\pi\alpha}{4}$, se obtiene

$$\hat{u}(x, \omega) = Ae^{\mu\nu x} + Be^{-\mu\nu x} \quad y \quad \hat{u}_x(x, \omega) = \mu\nu Ae^{\mu\nu x} - \mu\nu Be^{-\mu\nu x}. \quad (4-4)$$

Empleando los datos del problema inverso (4-1) en las expresiones anteriores cuando $x = 0$, se llega al sistema lineal

$$\hat{\tau}(\omega) = A + B$$

$$\hat{\sigma}(\omega) = \mu\nu A - \mu\nu B$$

cuya solución viene dada por

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{1}{2\mu\nu} \begin{bmatrix} \mu\nu & 1 \\ \mu\nu & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\tau}(\omega) \\ \hat{\sigma}(\omega) \end{bmatrix} \quad (4-5)$$

De manera análoga, empleando ahora las incógnitas del problema inverso (4-1) en las expresiones (4-4) cuando $x = 1$, se llega al sistema lineal

$$\begin{bmatrix} \hat{\xi}(\omega) \\ \hat{\beta}(\omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{\mu\nu} & e^{-\mu\nu} \\ \mu\nu e^{\mu\nu} & -\mu\nu e^{-\mu\nu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \quad (4-6)$$

Combinando (4-5) y (4-6) se sigue que

$$\begin{bmatrix} \hat{\xi}(\omega) \\ \hat{\beta}(\omega) \end{bmatrix} = \frac{1}{2\mu\nu} \begin{bmatrix} e^{\mu\nu} & e^{-\mu\nu} \\ \mu\nu e^{\mu\nu} & -\mu\nu e^{-\mu\nu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu\nu & 1 \\ \mu\nu & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\tau}(\omega) \\ \hat{\sigma}(\omega) \end{bmatrix}$$

y por tanto

$$\begin{bmatrix} \widehat{\xi}(\omega) \\ \widehat{\beta}(\omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cosh \mu\nu & \frac{1}{\mu\nu} \sinh \mu\nu \\ \mu\nu \sinh \mu\nu & \cosh \mu\nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widehat{\tau}(\omega) \\ \widehat{\sigma}(\omega) \end{bmatrix}.$$

Como

$$|\cosh \mu\nu| = \left| \cosh \left(|\omega|^{\alpha/2} \left[\cos \frac{\pi\alpha}{4} + i \sin \frac{\pi\alpha}{4} \right] \right) \right| \rightarrow \infty \quad \text{cuando} \quad |\omega| \rightarrow \infty$$

y

$$|\sinh \mu\nu| = \left| \sinh \left(|\omega|^{\alpha/2} \left[\cos \frac{\pi\alpha}{4} + i \sin \frac{\pi\alpha}{4} \right] \right) \right| \rightarrow \infty \quad \text{cuando} \quad |\omega| \rightarrow \infty,$$

obtener $\widehat{\xi}$ y $\widehat{\beta}$ a partir de los datos $\widehat{\tau}$ y $\widehat{\sigma}$ amplifica el error en las componentes de altas frecuencias por un factor de $\exp(|\omega|^{\alpha/2})$ y por tanto el TFIHCP (4-1) es un problema mal condicionado en las componentes de Fourier de las altas frecuencias.

4.2. Algoritmo de marcha en el espacio molificado

El problema inverso (4-1) es un problema mal condicionado que debe ser regularizado. En el problema molificado, $v := J_\delta u$ y $v_x := J_\delta u_x$ satisfacen

$$\begin{aligned} D_t^{(\alpha)} v(x, t) &= v_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < 1, \\ v(0, t) &= J_\delta \tau^\varepsilon(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{dato}, \\ v_x(0, t) &= J_\delta \sigma^\varepsilon(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{dato}, \\ v(1, t) &= J_\delta \xi(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{incógnita}, \\ v_x(1, t) &= J_\delta \beta(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{incógnita}, \\ v(x, 0) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \end{aligned} \tag{4-7}$$

donde $D_t^{(\alpha)} v = D_t^{(\alpha)} (J_\delta u) = J_\delta (D_t^{(\alpha)} u)$ como se muestra en (3-3).

Murio propone un esquema con regularización adaptativa que incorpora técnicas de molificación en cada paso [51]. La descripción del esquema es la siguiente. Sean M y N enteros positivos y $\Delta x = h = \frac{1}{M}$ y $\Delta t = k = \frac{1}{N}$ los parámetros de discretización. Para cada $m \in \{0, \dots, M\}$ y cada $n \in \{0, \dots, N\}$, las expresiones R_m^n , W_m^n y Q_m^n denotan las aproximaciones para la temperatura $v(x_m, t_n)$, el flujo de calor $v_x(x_m, t_n)$ y la derivada fraccionaria temporal $D_t^{(\alpha)} v(x_m, t_n)$ respectivamente, donde $x_m := mh$ y $t_n := kn$. El método consiste en aproximar a v_x y a $D_t^{(\alpha)} v = v_{xx}$ por medio del esquema de diferencias finitas

$$W_m^n = \frac{R_{m+1}^n - R_m^n}{h} \quad \text{y} \quad Q_m^n = \frac{W_{m+1}^n - W_m^n}{h}$$

para $m = 0, \dots, M - 1$ y $n = 1, \dots, N$. Esta aproximación conduce al esquema de marcha en el espacio

$$\begin{aligned} R_{m+1}^n &:= R_m^n + hW_m^n, \\ W_{m+1}^n &:= W_m^n + hQ_m^n, \\ m &= 0, \dots, M - 1, \quad n = 1, \dots, N. \end{aligned} \tag{4-8}$$

Una vez se realiza la marcha en el espacio con este esquema de diferencias finitas, las aproximaciones V_M^n y W_M^n , $n = 1, \dots, N$, son aceptadas como los valores molificados para la temperatura $J_\delta \xi$ y el flujo de calor $J_\delta \beta$ en la frontera $x = 1$.

El algoritmo (1) [51, Sección 4.1] utiliza el esquema de diferencias finitas (4-8) para aproximar la solución del problema molificado (4-7). La derivada fraccionaria se aproxima por (3-6).

Algoritmo 1 Algoritmo de marcha en el espacio molificado

Entrada: Parámetros α, h y k , y datos perturbados τ^ε y σ^ε .

Salida: R_M^n y W_M^n , $n = 1, \dots, N$.

- 1: Calcular $\sigma_{\alpha,k}$ y $\omega_i^{(\alpha)}$, $i = 1, \dots, N$.
 - 2: $R_j^0 \leftarrow 0$, $j = 0, \dots, M$.
 - 3: **para** $n = 1$ hasta N **hacer**
 - 4: $R_0^n \leftarrow J_{\delta_1^0} \tau^\varepsilon(nk)$, obteniendo automáticamente δ_1^0 , [49].
 - 5: $W_0^n \leftarrow J_{\delta_2^0} \sigma^\varepsilon(nk)$, obteniendo automáticamente δ_2^0 , [49].
 - 6: $Q_0^n \leftarrow C^{(\alpha)} \left(J_{\delta_1^0} \tau^\varepsilon(nk) \right)$.
 - 7: **fin para**
 - 8: **para** $m = 0$ hasta $M - 1$ **hacer**
 - 9: $R_{m+1}^n \leftarrow R_m^n + hW_m^n$, $n = 1, \dots, N$.
 - 10: $Q_m^n \leftarrow C^{(\alpha)} \left(J_{\delta_1^m} R_m^n \right)$, $n = 1, \dots, N$, obteniendo automáticamente δ_1^j , [49].
 - 11: $W_{m+1}^n \leftarrow W_m^n + hQ_m^n$, $n = 1, \dots, N$.
 - 12: **fin para**
-

Observación 4.2.1. $R_0^n = J_\eta(\tau^\varepsilon(nk))$, $W_0^n = J_\eta(\sigma^\varepsilon(nk))$, and $Q_0^n = C^{(\alpha)}(J_\eta \tau^\varepsilon(nk))$ son obtenidos a partir de los datos perturbados medidos.

La convergencia del algoritmo [51, Sección 4.2] se enuncia a continuación.

Teorema 4.2.1 (convergencia formal del algoritmo). *El algoritmo de marcha en el espacio molificado (1) converge a la solución molificada del problema (4-7).*

4.3. Generación de datos para el algoritmo

Con el propósito de generar los datos necesarios para modelar el TFIHCP (4-1), es necesario primero resolver el correspondiente problema directo TFDE (ver observación 3.2.1). Puesto

que no se dispone de una fórmula cerrada simple para la solución exacta del problema directo, Murio utiliza el esquema implícito de diferencias finitas (3-11).

El procedimiento para generar los datos para el problema inverso TFIHCP (4-7) consiste en introducir los problemas directos auxiliares

$$\begin{aligned} D_t^{(\alpha)} w(x, t) &= w_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\ w(0, t) &= w_0^\varepsilon(t), \quad t > 0, \\ w(1, t) &= w_1^\varepsilon(t), \quad t > 0, \\ w(x, 0) &= f(x), \quad 0 \leq x \leq 1 \end{aligned} \tag{4-9}$$

y

$$\begin{aligned} D_t^{(\alpha)} z(x, t) &= z_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\ z(0, t) &= 0, \quad t > 0, \\ z(1, t) &= 0, \quad t > 0, \\ z(x, 0) &= f(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \end{aligned} \tag{4-10}$$

cuyas soluciones exactas w y z se aproximan por medio del esquema (3-11). Haciendo $u(x, t) := w(x, t) - z(x, t)$, se obtienen los datos $u(0, t) = w(0, t) - z(0, t) = w_0^\varepsilon(t)$ y $u_x(0, t) = w_x(0, t) - z_x(0, t)$ que pueden ser empleados para iniciar el algoritmo (1). Esto permite entonces obtener como “soluciones exactas” del problema inverso (4-7) a $u(1, t) = w(1, t) - z(1, t) = w_1^\varepsilon(t)$ y $u_x(1, t) = w_x(1, t) - z_x(1, t)$. Para el cálculo de la derivada $u_x(0, t_n)$ se utilizan las aproximaciones

$$w_x(0, t_n) = \frac{w_1^n - w_0^n}{h} + O(h) \quad \text{y} \quad z_x(0, t_n) = \frac{z_1^n - z_0^n}{h} + O(h),$$

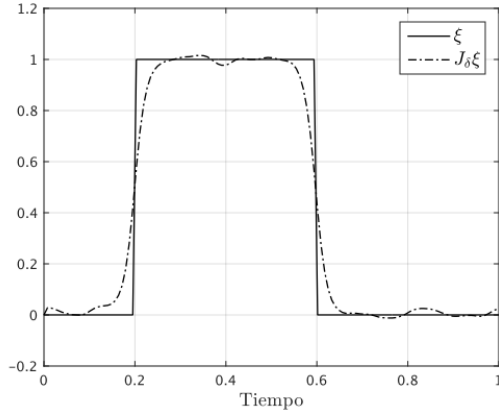
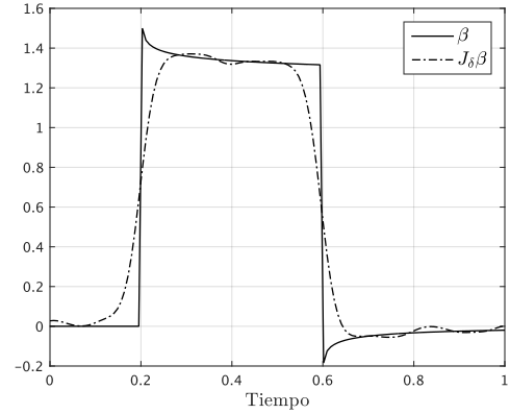
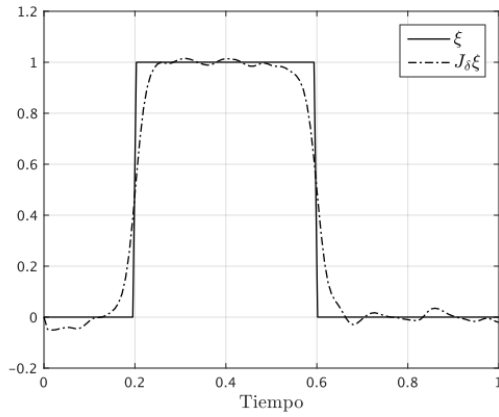
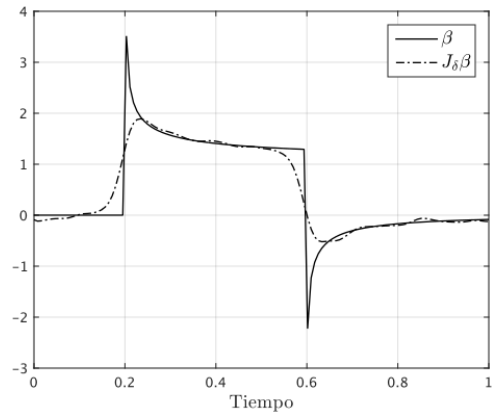
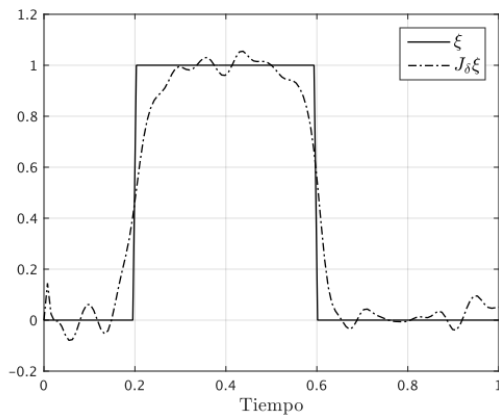
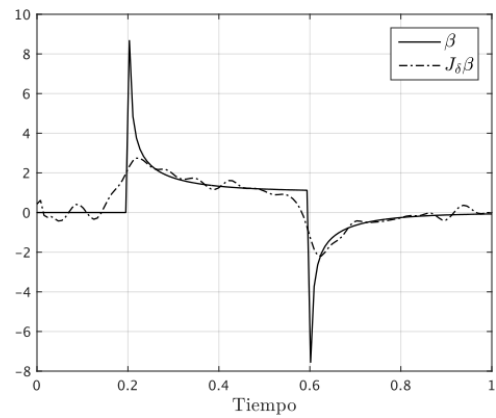
y para la derivada $u_x(1, t_n)$ se utilizan las aproximaciones

$$w_x(1, t_n) = \frac{w_M^n - w_{M-1}^n}{h} + O(h) \quad \text{y} \quad z_x(1, t_n) = \frac{z_M^n - z_{M-1}^n}{h} + O(h).$$

4.4. Ejemplos numéricos

Algunos resultados del algoritmo marcha en el espacio (1) para resolver el problema molificado (4-7) se ilustran en la figura (4-1). Como problema de prueba se consideran los datos $w_0(t) := 0$ y

$$w_1(t) := \begin{cases} 1, & \text{si } 0.2 \leq t \leq 0.6, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

(a) Temperatura aproximada para $\alpha = 0.1$ (b) Flujo de calor aproximado para $\alpha = 0.1$ (c) Temperatura aproximada para $\alpha = 0.5$ (d) Flujo de calor aproximado para $\alpha = 0.5$ (e) Temperatura aproximada para $\alpha = 0.9$ (f) Flujo de calor aproximado para $\alpha = 0.9$ **Figura 4-1:** Soluciones para $h = 1/100$, $k = 1/128$ y $\varepsilon = 0.05$.

Para este caso la solución exacta ξ del problema inverso (4-1) viene dada por $\xi(t) := w_1(t)$.

h	k	Temperatura $\alpha = 0.10$	Temperatura $\alpha = 0.50$	Temperatura $\alpha = 0.90$
$\varepsilon = 0.01$				
1/50	1/64	0.172403	0.181726	0.198920
1/50	1/128	0.124880	0.134868	0.177711
1/50	1/256	0.109598	0.118505	0.152474
1/100	1/64	0.208845	0.214450	0.224866
1/100	1/128	0.148492	0.155030	0.172485
1/100	1/256	0.128764	0.135522	0.153479
$\varepsilon = 0.05$				
1/50	1/64	0.177493	0.191686	0.195473
1/50	1/128	0.131738	0.152549	0.286654
1/50	1/256	0.116873	0.129501	0.175144
1/100	1/64	0.220210	0.226117	0.246021
1/100	1/128	0.150831	0.159678	0.237394
1/100	1/256	0.130979	0.142918	0.165094

Tabla 4-1: Errores relativos para diferentes parámetros.

La implementación del esquema la realizamos en MATLAB 8.5, R2015a. Las perturbaciones para los datos se simulan por medio de números aleatorios que distribuyen uniformemente en $[-\varepsilon, \varepsilon]$. Para la molificación de los datos utilizamos las rutinas desarrolladas por Carlos D. Acosta. Los errores para la aproximación de la temperatura en la frontera $x = 1$ son medidos por el valor cuadrático medio

$$\frac{\left(\frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N |R_M^n - \xi(t_n)|^2 \right)^{1/2}}{\left(\frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N |\xi(t_n)|^2 \right)^{1/2}}$$

La tabla (4-1) contiene un listado de errores cometidos en la aproximación de la temperatura molificada $J_\delta \xi$, para perturbaciones de $\varepsilon = 0.01$ y $\varepsilon = 0.05$ y para una variedad de parámetros de discretización h y k .

En el siguiente capítulo se presenta el resultado principal de esta tesis: la solución de un problema inverso de advección-dispersión, que hace parte de un manuscrito en preparación para publicación.

5 Problema inverso de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria

En este capítulo planteamos un problema inverso para una ecuación de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria, en un dominio espacial unidimensional. El problema inverso involucra la reconstrucción simultánea de la concentración de soluto y del flujo de dispersión en una de las fronteras del dominio espacial, a partir de lecturas de datos perturbados en la otra frontera. Mostramos que el problema inverso es mal condicionado y para resolverlo proponemos un esquema de diferencias finitas de marcha en el espacio, que utiliza modificación discreta como técnica de regularización. Se incluyen estimativos de error y ejemplos numéricos ilustrativos.

5.1. Planteamiento del problema

El problema inverso de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria TFIADP aquí propuesto es una generalización del problema inverso de conducción de calor IHCP que surge cuando la ecuación de difusión del modelo es reemplazada por una ecuación de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria.

El TFIADP a considerar viene dado por

$$\begin{aligned} D_t^{(\alpha)} u(x, t) + au_x(x, t) &= du_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < 1, \\ u(0, t) &= \tau(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{dato}, \\ u_x(0, t) &= \sigma(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{dato}, \\ u(1, t) &= \xi(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{incógnita}, \\ u_x(1, t) &= \beta(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{incógnita}, \\ u(x, 0) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \end{aligned} \tag{5-1}$$

donde u representa la concentración de soluto y $D_t^{(\alpha)} u$ denota la derivada fraccionaria temporal de Caputo (3-7). La constante $a > 0$ representa la velocidad promedio del fluido y la constante $d > 0$ representa el coeficiente de dispersión.

Las funciones τ y σ no se conocen con exactitud, sino datos perturbados τ^ε y σ^ε que satisfacen los estimativos de error $\|\tau - \tau^\varepsilon\|_\infty < \varepsilon$ y $\|\sigma - \sigma^\varepsilon\|_\infty < \varepsilon$ para algún $\varepsilon > 0$. El objetivo es determinar la concentración de soluto ξ y el flujo de dispersión β en la frontera $x = 1$, a partir de mediciones de la concentración de soluto τ y del flujo de dispersión σ en la frontera $x = 0$.

A continuación demostramos que el TFIADP (5-1) es un problema mal condicionado. Para esto suponemos que todas las funciones involucradas están en $L^2(\mathbb{R})$, extendiéndolas a toda la recta $-\infty < t < \infty$ de manera tal que sean cero para $t < 0$. Al tomar la transformada de Fourier en $D_t^{(\alpha)}u + au_x = du_{xx}$ respecto a la variable temporal (ver teorema 3.1.1), obtenemos la ecuación diferencial ordinaria

$$(i\omega)^\alpha \hat{u}(x, \omega) + a \hat{u}_x(x, \omega) = d \hat{u}_{xx}(x, \omega), \quad 0 < x < 1, \quad -\infty < \omega < \infty, \quad (5-2)$$

donde $(i\omega)^\alpha = |\omega|^\alpha e^{i\varsigma\pi\alpha/2}$, con $\varsigma := \text{sgn}(\omega)$. La solución general de (5-2) viene dada por

$$\hat{u}(x, \omega) = Ae^{k_1 x} + Be^{k_2 x}, \quad (5-3)$$

donde k_1 y k_2 son las dos raíces cuadradas complejas del número complejo $a^2 + 4d(i\omega)^\alpha$, esto es,

$$k_1 := |a^2 + 4d(i\omega)^\alpha|^{1/2} \left(\cos \frac{\theta}{2} + i \sin \frac{\theta}{2} \right) \quad y \quad k_2 := -k_1,$$

con

$$\theta = \arg(a^2 + 4d(i\omega)^\alpha) = \tan^{-1} \left(\frac{4d|\omega|^\alpha \sin \frac{\varsigma\pi\alpha}{2}}{a^2 + 4d|\omega|^\alpha \cos \frac{\varsigma\pi\alpha}{2}} \right). \quad (5-4)$$

Haciendo $\mu := |a^2 + 4d(i\omega)^\alpha|^{1/2}$ y $\nu := \cos \frac{\theta}{2} + i \sin \frac{\varsigma\theta}{2}$, la solución general (5-3) y su derivada se pueden escribir como

$$\hat{u}(x, \omega) = Ae^{\mu\nu x} + Be^{-\mu\nu x} \quad y \quad \hat{u}_x(x, \omega) = \mu\nu Ae^{\mu\nu x} - \mu\nu Be^{-\mu\nu x}. \quad (5-5)$$

Empleando los datos del problema inverso (5-1) en las expresiones anteriores cuando $x = 0$, obtenemos el sistema lineal

$$\begin{aligned} \hat{\tau}(\omega) &= A + B \\ \hat{\sigma}(\omega) &= \mu\nu A - \mu\nu B, \end{aligned}$$

cuya solución viene dada por

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{1}{2\mu\nu} \begin{bmatrix} \mu\nu & 1 \\ \mu\nu & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\tau}(\omega) \\ \hat{\sigma}(\omega) \end{bmatrix}. \quad (5-6)$$

De nuevo, empleando ahora las incógnitas del problema inverso (5-1) en las expresiones (5-5) cuando $x = 1$, obtenemos

$$\begin{bmatrix} \hat{\xi}(\omega) \\ \hat{\beta}(\omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{\mu\nu} & e^{-\mu\nu} \\ \mu\nu e^{\mu\nu} & -\mu\nu e^{-\mu\nu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \quad (5-7)$$

Combinando (5-6) y (5-7) se sigue que

$$\begin{bmatrix} \hat{\xi}(\omega) \\ \hat{\beta}(\omega) \end{bmatrix} = \frac{1}{2\mu\nu} \begin{bmatrix} e^{\mu\nu} & e^{-\mu\nu} \\ \mu\nu e^{\mu\nu} & -\mu\nu e^{-\mu\nu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu\nu & 1 \\ \mu\nu & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\tau}(\omega) \\ \hat{\sigma}(\omega) \end{bmatrix}$$

y por tanto

$$\begin{bmatrix} \hat{\xi}(\omega) \\ \hat{\beta}(\omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cosh \mu\nu & \frac{1}{\mu\nu} \sinh \mu\nu \\ \mu\nu \sinh \mu\nu & \cosh \mu\nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\tau}(\omega) \\ \hat{\sigma}(\omega) \end{bmatrix}.$$

Como

$$|a^2 + 4d(i\omega)^\alpha|^{1/2} = \left(a^4 + 16d^2|\omega|^{2\alpha} + 8da^2|\omega|^\alpha \cos \frac{\alpha\pi}{2}\right)^{1/4} \rightarrow \infty \quad \text{cuando} \quad |\omega| \rightarrow \infty$$

y

$$\theta = \tan^{-1} \left(\frac{4d|\omega|^\alpha \sin \frac{\varsigma\pi\alpha}{2}}{a^2 + 4d|\omega|^\alpha \cos \frac{\varsigma\pi\alpha}{2}} \right) \rightarrow \frac{\varsigma\pi\alpha}{2} \quad \text{cuando} \quad |\omega| \rightarrow \infty,$$

se tiene que

$$|\cosh \mu\nu| = \left| \cosh \left(|a^2 + 4d(i\omega)^\alpha|^{1/2} \left[\cos \frac{\theta}{2} + i \sin \frac{\varsigma\theta}{2} \right] \right) \right| \rightarrow \infty \quad \text{cuando} \quad |\omega| \rightarrow \infty$$

y

$$|\sinh \mu\nu| = \left| \sinh \left(|a^2 + 4d(i\omega)^\alpha|^{1/2} \left[\cos \frac{\theta}{2} + i \sin \frac{\varsigma\theta}{2} \right] \right) \right| \rightarrow \infty \quad \text{cuando} \quad |\omega| \rightarrow \infty,$$

y por tanto obtener $\hat{\xi}$ y $\hat{\beta}$ a partir de los datos $\hat{\tau}$ y $\hat{\sigma}$ amplifica el error en las componentes de altas frecuencias por un factor de $\exp \left(|a^2 + 4d(i\omega)^\alpha|^{1/2} \right)$. Se concluye entonces que el TFICHP (5-1) es un problema mal condicionado en las componentes de Fourier de altas frecuencias.

5.2. Algoritmo de marcha en el espacio molificado

El problema inverso (5-1) es un problema mal condicionado que debe ser regularizado. En el problema molificado a considerar, $v := J_\delta u$ y $v_x := J_\delta u_x$ satisfacen

$$\begin{aligned}
 D_t^{(\alpha)} v(x, t) + av(x, t) &= dv_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < 1, \\
 v(0, t) &= J_\delta \tau^\varepsilon(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{dato}, \\
 v_x(0, t) &= J_\delta \sigma^\varepsilon(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{dato}, \\
 v(1, t) &= J_\delta \xi(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{incógnita}, \\
 v_x(1, t) &= J_\delta \beta(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad \text{incógnita}, \\
 v(x, 0) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1,
 \end{aligned} \tag{5-8}$$

donde $D_t^{(\alpha)} v = D_t^{(\alpha)} (J_\delta u) = J_\delta \left(D_t^{(\alpha)} u \right)$ como se muestra en (3-3).

Siguiendo a Murio [51], proponemos un esquema con regularización adaptativa que incorpora técnicas de molificación en cada paso. La descripción del esquema es la siguiente. Sean M y N enteros positivos y $\Delta x = h = \frac{1}{M}$ y $\Delta t = k = \frac{1}{N}$ los parámetros de discretización. Para cada $m \in \{0, \dots, M\}$ y cada $n \in \{0, \dots, N\}$, las expresiones R_m^n , W_m^n y Q_m^n denotan las aproximaciones para la concentración de soluto $v(x_m, t_n)$, el flujo de dispersión $v_x(x_m, t_n)$ y la derivada fraccionaria temporal $D_t^{(\alpha)} v(x_m, t_n)$ respectivamente, donde $x_m := mh$ y $t_n := kn$. El método consiste en aproximar a v_x y a $D_t^{(\alpha)} v + av_x = dv_{xx}$ por medio del esquema de diferencias finitas

$$W_m^n = \frac{R_{m+1}^n - R_m^n}{h} \quad \text{y} \quad Q_m^n + a W_m^n = d \frac{W_{m+1}^n - W_m^n}{h}$$

para $m = 0, \dots, M-1$ y $n = 1, 2, \dots, N$. Esta aproximación conduce al esquema de marcha en el espacio

$$\begin{aligned}
 R_{m+1}^n &:= R_m^n + h W_m^n, \\
 W_{m+1}^n &:= \left(1 + \frac{a}{d} h \right) W_m^n + \frac{h}{d} Q_j^n, \\
 m &= 0, \dots, M-1, \quad n = 1, 2, \dots, N.
 \end{aligned} \tag{5-9}$$

Una vez realizada la marcha en el espacio con este esquema de diferencias finitas, las aproximaciones V_M^n y W_M^n , $n = 1, \dots, N$, son aceptadas como los valores molificados para la concentración de soluto $J_\delta \xi$ y para el flujo de dispersión $J_\delta \beta$ en la frontera $x = 1$.

El algoritmo (2) utiliza el esquema de diferencias finitas (5-9) para aproximar la solución del problema molificado (5-8). Para la evaluación de la derivada temporal fraccionaria se utiliza el operador $C^{(\alpha)}$ del lema (3.1.1).

Algoritmo 2 Algoritmo de marcha en el espacio molificado**Entrada:** Parámetros α, a, d, h y k , y datos perturbados τ^ε y σ^ε .**Salida:** R_M^n y W_M^n , $n = 1, \dots, N$.

- 1: Calcular $\sigma_{\alpha,k}$ y $\omega_i^{(\alpha)}$, $i = 1, \dots, N$.
- 2: $R_j^0 \leftarrow 0$, $j = 0, \dots, M$.
- 3: **para** $n = 1$ hasta N **hacer**
- 4: $R_0^n \leftarrow J_{\delta_1^0} \tau^\varepsilon(nk)$, obteniendo automáticamente δ_1^0 , [49].
- 5: $W_0^n \leftarrow J_{\delta_2^0} \sigma^\varepsilon(nk)$, obteniendo automáticamente δ_2^0 , [49].
- 6: $Q_0^n \leftarrow C^{(\alpha)} \left(J_{\delta_1^0} \tau^\varepsilon(nk) \right)$.
- 7: **fin para**
- 8: **para** $m = 0$ hasta $M - 1$ **hacer**
- 9: $R_{m+1}^n \leftarrow R_m^n + h W_m^n$, $n = 1, \dots, N$.
- 10: $Q_m^n \leftarrow C^{(\alpha)} \left(J_{\delta_1^m} R_m^n \right)$, $n = 1, \dots, N$, obteniendo automáticamente δ_1^j , [49].
- 11: $W_{m+1}^n \leftarrow \left(1 + \frac{a}{d} h \right) W_m^n + \frac{h}{d} Q_m^n$, $n = 1, \dots, N$.
- 12: **fin para**

Observación 5.2.1. $R_0^n = J_\eta(\tau^\varepsilon(nk))$, $W_0^n = J_\eta(\sigma^\varepsilon(nk))$, and $Q_0^n = C^{(\alpha)}(J_\eta \tau^\varepsilon(nk))$ son obtenidos a partir de los datos perturbados medidos.

Con el fin de establecer algunos estimativos de error, introducimos las funciones de error discretas

$$\Delta R_m^n := R_m^n - v(mh, nk) \quad \text{y} \quad \Delta W_m^n := W_m^n - v_x(mh, nk) \quad (5-10)$$

para $m \in \{0, \dots, M\}$ y $n \in \{0, \dots, N\}$. También definimos

$$|\Delta R_m| := \max_{0 \leq n \leq N} |\Delta R_m^n| \quad \text{y} \quad |\Delta W_m| := \max_{0 \leq n \leq N} |\Delta W_m^n|, \quad m \in \{0, \dots, M\}. \quad (5-11)$$

Lema 5.2.1. Existe una constante $C > 0$ tal que

$$\max\{|\Delta R_0|, |\Delta W_0|\} \leq C(\delta + k). \quad (5-12)$$

Demostración. Por el teorema 2.2.1, para cada $n \in \{0, \dots, N\}$, existen constantes positivas C_n y D_n tales que

$$|\Delta R_0^n| = |R_0^n - v(0, nk)| = |J_\eta(\tau^\varepsilon(nk)) - v(0, nk)| \leq C_n(\delta + k)$$

y

$$|\Delta W_0^n| = |W_0^n - v_x(0, nk)| = |J_\eta(\sigma^\varepsilon(nk)) - v_x(0, nk)| \leq D_n(\delta + k)$$

y por tanto

$$\max\{|\Delta R_0^n|, |\Delta W_0^n|\} \leq C(\delta + k),$$

donde $C := \max\{C_n, D_n \mid n = 0, \dots, N\}$. Al tomar el máximo sobre n se obtiene el resultado deseado. \square

Siguiendo a Murio [51], tenemos la siguiente cota que involucra el parámetro δ .

Lema 5.2.2. *Existe una constante $C_\alpha > 0$ tal que*

$$|Q_m^n - D_t^{(\alpha)} v(mh, nk)| \leq C_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(k) \quad (5-13)$$

Demostración.

$$\begin{aligned} \left| Q_m^n - D_t^{(\alpha)} v(mh, nk) \right| &= \left| D_t^{(\alpha)} J_\delta u^\varepsilon(mh, nk) - D_t^{(\alpha)} J_\delta u(mh, nk) + O(k) \right|, \quad \text{por (3-6)} \\ &\leq \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{nk} \frac{C\varepsilon/\delta}{(nk-s)^\alpha} ds + O(k), \quad \text{por teorema 2.2.1} \\ &\leq \frac{C}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\varepsilon (nk)^{1-\alpha}}{\delta} + O(k) \\ &= C_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(k). \end{aligned} \quad \square$$

La convergencia del método se establece en el siguiente teorema.

Teorema 5.2.1 (Convergencia formal del algoritmo). *El algoritmo de marcha en el espacio molificado (2) converge a la solución del problema inverso (5-1).*

Demostración. Sin pérdida de generalidad, suponemos el coeficiente de dispersión $d = 1$. Al desarrollar en Taylor la concentración de soluto molificada $v(x, t)$,

$$\begin{aligned} v((m+1)h, nk) &= v(mh, nk) + hv_x(mh, nk) + O(h^2), \\ v_x((m+1)h, nk) &= v_x(mh, nk) + h \left(D_t^{(\alpha)} v(mh, nk) + av_x(mh, nk) \right) + O(h^2), \end{aligned}$$

las funciones de error discretas (5-10) se pueden expresar como

$$\begin{aligned} \Delta R_{m+1}^n &= R_{m+1}^n - v((m+1)h, nk) \\ &= R_m^n + hW_m^n - v((m+1)h, nk), \quad \text{por (5-9)} \\ &= R_m^n + hW_m^n - v(mh, nk) - hv_x(mh, nk) + O(h^2) \\ &= (R_m^n - v(mh, nk)) + h(W_m^n - v_x(mh, nk)) + O(h^2) \\ &= \Delta R_m^n + h\Delta W_m^n + O(h^2) \end{aligned} \quad (5-14)$$

y

$$\begin{aligned} \Delta W_{m+1}^n &= W_{m+1}^n - v_x((m+1)h, nk) \\ &= (1+ah)W_m^n + hQ_m^n - v_x((m+1)h, nk), \quad \text{por (5-9)} \\ &= (1+ah)W_m^n + hQ_m^n - v_x(mh, nk) - h \left(D_t^{(\alpha)} v(mh, nk) + av_x(mh, nk) \right) + O(h^2) \\ &= (1+ah)W_m^n + hQ_m^n - (1+ah)v_x(mh, nk) - hD_t^{(\alpha)} v(mh, nk) + O(h^2) \\ &= (1+ah)(W_m^n - v_x(mh, nk)) + h \left[Q_m^n - \left(D_t^{(\alpha)} v(mh, nk) \right) \right] + O(h^2) \\ &= (1+ah)\Delta W_j^n + hC_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(hk) + O(h^2), \quad \text{por (5-13)}. \end{aligned} \quad (5-15)$$

De (5-14) and (5-15) se sigue que

$$\begin{aligned} |\Delta R_{m+1}^n| &\leq |\Delta R_m^n| + h |\Delta W_m^n| + O(h^2) \\ &\leq \max_{0 \leq n \leq N} |\Delta R_j^n| + h \cdot \max_{0 \leq n \leq N} |\Delta W_j^n| + O(h^2) \\ &\leq |\Delta R_m| + h |\Delta W_m| + O(h^2) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} |\Delta W_{m+1}^n| &\leq (1 + ah) |\Delta W_m^n| + O(hk) + O(h^2) \\ &\leq (1 + ah) \cdot \max_{0 \leq n \leq N} |\Delta W_m^n| + hC_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(hk) + O(h^2) \\ &= (1 + ah) |\Delta W_m| + hC_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(hk) + O(h^2), \end{aligned}$$

por lo cual

$$\begin{aligned} |\Delta R_{m+1}| &= \max_{0 \leq n \leq N} |\Delta R_{m+1}^n| \leq |\Delta R_m| + h |\Delta W_m| + O(h^2), \\ |\Delta W_{m+1}| &= \max_{0 \leq n \leq N} |\Delta W_{m+1}^n| \leq (1 + ah) |\Delta W_m| + hC_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(hk) + O(h^2). \end{aligned}$$

De esta forma

$$\begin{aligned} |\Delta R_{m+1}| &\leq |\Delta R_m| + h \cdot |\Delta W_m| + O(h^2) \\ &\leq (1 + h) \cdot \max\{|\Delta R_m|, |\Delta W_m|\} + O(h^2) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} |\Delta W_{m+1}| &\leq (1 + ah) |\Delta W_m| + hC_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(hk) + O(h^2) \\ &\leq (1 + ah) \cdot \max\{|\Delta R_m|, |\Delta W_m|\} + hC_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(hk) + O(h^2), \end{aligned}$$

Haciendo $c := \max\{1, a\}$ se concluye que

$$\max\{|\Delta R_{m+1}|, |\Delta W_{m+1}|\} \leq (1 + ch) \cdot \max\{|\Delta R_m|, |\Delta W_m|\} + hC_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(hk) + O(h^2)$$

para $m = 0, \dots, M - 1$. Por inducción se verifica que

$$\max\{|\Delta R_M|, |\Delta W_M|\} \leq (1 + ch)^M \max\{|\Delta R_0|, |\Delta W_0|\} + \sum_{i=0}^{M-1} (1 + ch)^i \left(hC_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(hk) + O(h^2) \right)$$

y como $(1 + ch)^M < e$ para $h > 0$ pequeño y además

$$\sum_{i=0}^{M-1} (1 + ch)^i = \frac{1 - (1 + h)^M}{1 - (1 + h)} = \frac{(1 + h)^M - 1}{h} = \frac{\left(1 + \frac{1}{1/h}\right)^{1/h} - 1}{h} < \frac{e}{h},$$

concluimos entonces que

$$\max\{|\Delta R_M|, |\Delta W_M|\} \leq e \cdot \max\{|\Delta R_0|, |\Delta W_0|\} + e C_\alpha \frac{\varepsilon}{\delta} + O(k) + O(h).$$

Por el lema (5.2.1), existe una constante $C > 0$ tal que

$$\max\{|\Delta R_M|, |\Delta W_M|\} \leq C \left(\delta + \frac{\varepsilon}{\delta} + k \right) + O(k) + O(h). \quad (5-16)$$

Eligiendo $\delta := O(\varepsilon^{1/2})$ por ejemplo, obtenemos que

$$\max\{|\Delta R_M|, |\Delta W_M|\} \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad h, k, \varepsilon \rightarrow 0$$

y por tanto la solución numérica converge a la solución del problema (5-1), lo que muestra la convergencia formal del algoritmo. \square

Observación 5.2.2. *La cota (5-16) evidencia el mal condicionamiento del problema inverso no molificado (5-1).*

5.3. Generación de datos para el algoritmo

Para aproximar las soluciones del problema directo que son requeridas por el TFIADP (5-8), empleamos el esquema de diferencias finitas (3-16) propuesto en la sección (3.3.2). El procedimiento consiste en introducir los problemas directos auxiliares

$$D_t^{(\alpha)} w(x, t) + aw(x, t) = dw_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0,$$

$$w(0, t) = w_0^\varepsilon(t), \quad t > 0,$$

$$w(1, t) = w_1^\varepsilon(t), \quad t > 0,$$

$$w(x, 0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq 1$$

y

$$D_t^{(\alpha)} z(x, t) + az(x, t) = dz_{xx}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0,$$

$$z(0, t) = 0, \quad t > 0,$$

$$z(1, t) = 0, \quad t > 0,$$

$$z(x, 0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq 1,$$

cuyas soluciones exactas w y z se aproximan por medio del esquema (3-16). Haciendo $u(x, t) := w(x, t) - z(x, t)$, se obtienen los datos $u(0, t) = w(0, t) - z(0, t) = w_0^\varepsilon(t)$ y $u_x(0, t) = w_x(0, t) - z_x(0, t)$ que pueden ser empleados para iniciar el algoritmo (2). Esto nos permite entonces obtener como “soluciones exactas” del problema inverso (5-8) a

$$u(1, t) = w(1, t) - z(1, t) = w_1^\varepsilon(t) \text{ y } u_x(1, t) = w_x(1, t) - z_x(1, t).$$

Las derivadas $u_x(0, t_n)$ y $u_x(1, t_n)$ se aproximan por medio de

$$w_x(0, t_n) = \frac{w_1^n - w_0^n}{h} + O(h),$$

$$z_x(0, t_n) = \frac{z_1^n - z_0^n}{h} + O(h),$$

y

$$w_x(1, t_n) = \frac{w_M^n - w_{M-1}^n}{h} + O(h),$$

$$z_x(1, t_n) = \frac{z_M^n - z_{M-1}^n}{h} + O(h),$$

respectivamente.

5.4. Ejemplos numéricos

Algunos resultados del algoritmo marcha en el espacio (2) para resolver el problema molificado (5-8) se ilustran a continuación. Los errores cometidos al aproximar la concentración de soluto y el flujo de dispersión en la frontera $x = 1$, son medidos por medio de

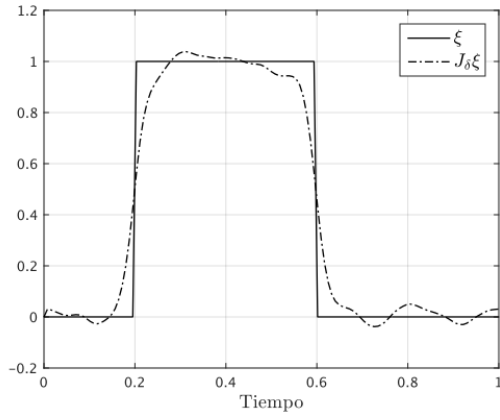
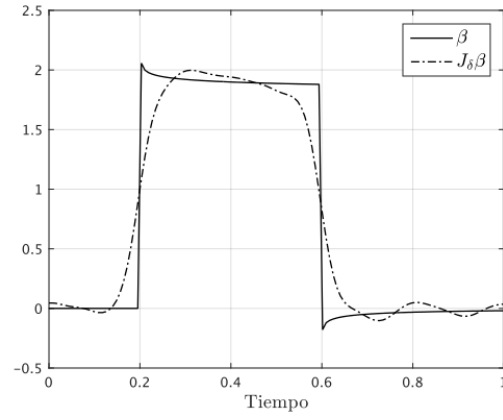
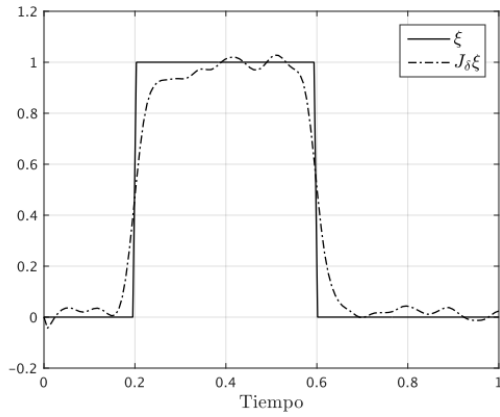
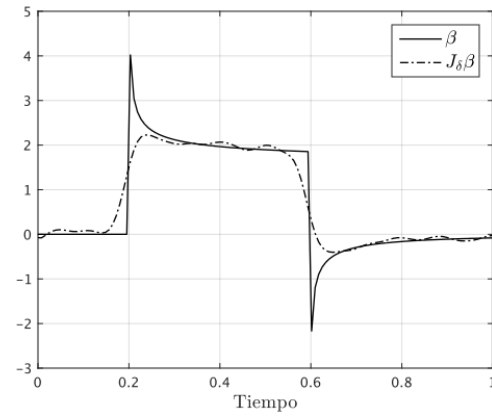
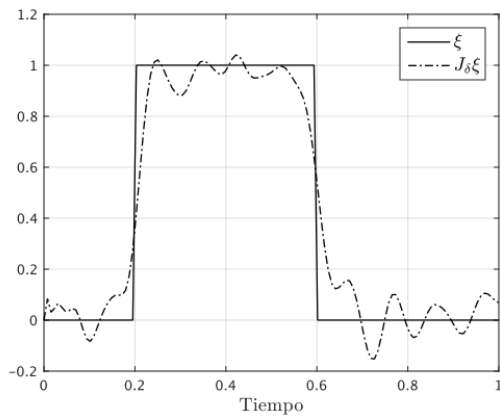
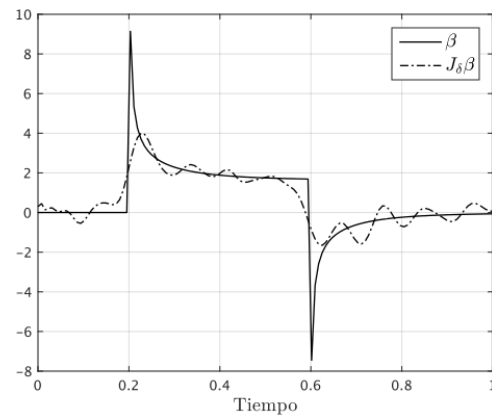
$$\frac{\left(\frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N |R_M^n - \xi(t_n)|^2 \right)^{1/2}}{\left(\frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N |\xi(t_n)|^2 \right)^{1/2}} \quad \text{y} \quad \frac{\left(\frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N |W_M^n - \beta(t_n)|^2 \right)^{1/2}}{\left(\frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N |\beta(t_n)|^2 \right)^{1/2}},$$

respectivamente. La implementación del esquema la realizamos en MATLAB 8.5, R2015a. Las perturbaciones para los datos se simulan por medio de números aleatorios que distribuyen uniformemente en $[-\varepsilon, \varepsilon]$. Para la molificación de los datos utilizamos las rutinas desarrolladas por Carlos D. Acosta.

Ejemplo 5.4.1. *Como primer problema de prueba consideramos los datos $w_0(t) := 0$ y*

$$w_1(t) := \begin{cases} 1, & \text{si } 0.2 \leq t \leq 0.6, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Para este caso la solución exacta ξ del problema inverso (5-1) viene dada por $\xi(t) := w_1(t)$.

(a) Concentración de soluto para $\alpha = 0.1$ (b) Flujo de dispersión para $\alpha = 0.1$ (c) Concentración de soluto para $\alpha = 0.5$ (d) Flujo de dispersión para $\alpha = 0.5$ (e) Concentración de soluto para $\alpha = 0.9$ (f) Flujo de dispersión para $\alpha = 0.9$ **Figura 5-1:** Soluciones para $h = 1/100$, $k = 1/128$ y $\varepsilon = 0.05$.

Todas las figuras para este ejemplo (observar las diferentes escalas) fueron generadas con los

h	k	Soluto $\alpha = 0.10$	Soluto $\alpha = 0.50$	Soluto $\alpha = 0.90$
$\varepsilon = 0.01$				
1/50	1/64	0.182925	0.199033	0.208268
1/50	1/128	0.133179	0.143099	0.182033
1/50	1/256	0.116132	0.127097	0.181813
1/100	1/64	0.221125	0.224531	0.230825
1/100	1/128	0.157988	0.163531	0.185889
1/100	1/256	0.136027	0.141949	0.156036
$\varepsilon = 0.05$				
1/50	1/64	0.197357	0.199562	0.257106
1/50	1/128	0.149018	0.168764	0.275123
1/50	1/256	0.124136	0.144996	0.198584
1/100	1/64	0.231876	0.231023	0.260024
1/100	1/128	0.168989	0.184719	0.250334
1/100	1/256	0.143509	0.147636	0.180813

Tabla 5-1: Errores relativos para diferentes parámetros

parámetros de discretización $h = 1/100$ y $k = 1/128$.

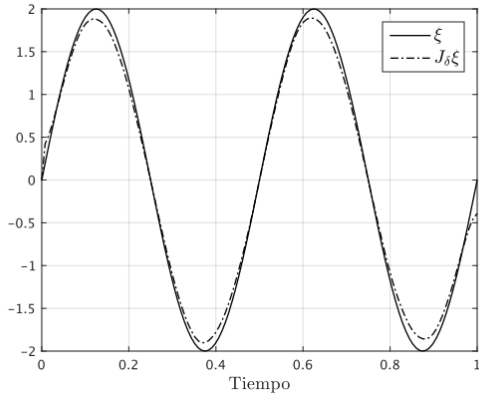
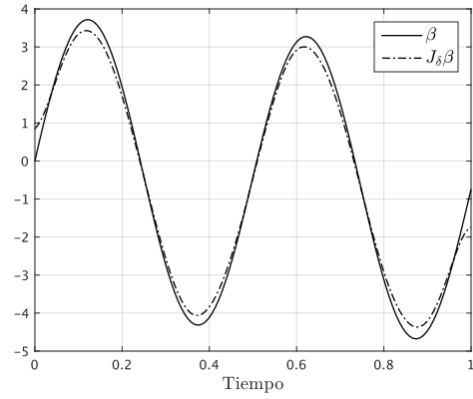
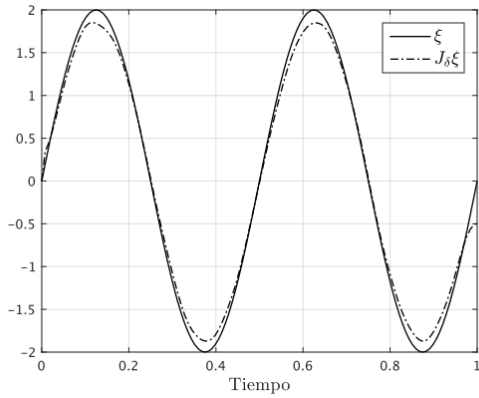
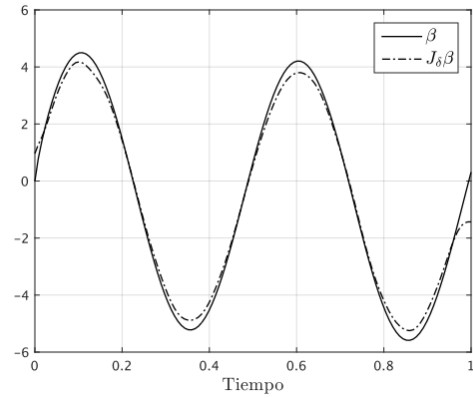
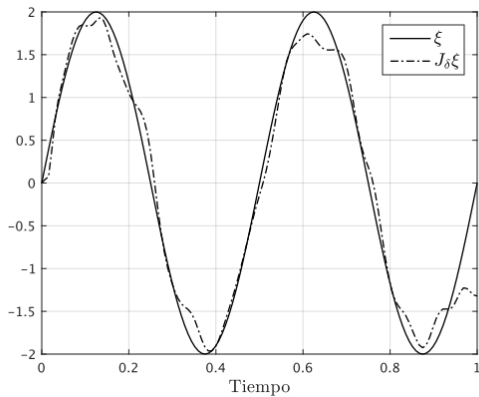
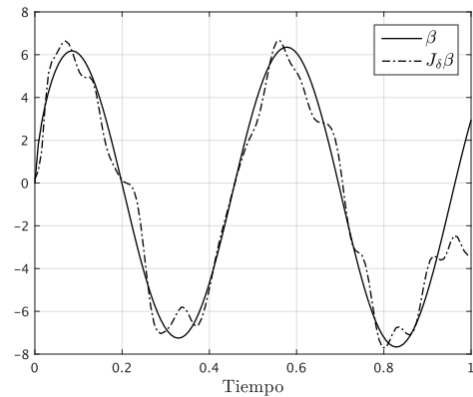
La tabla (5-1) contiene un listado de errores cometidos en la aproximación de la concentración de soluto molificada $J_\delta \xi$, para perturbaciones de $\varepsilon = 0.01$ y $\varepsilon = 0.05$ y para una variedad de parámetros de discretización h y k .

Note que no se presentan cambios significativos en las aproximaciones para los parámetros de discretización evaluados de la región $[1/100, 1/50] \times [1/256, 1/64]$.

Ejemplo 5.4.2. En este problema de prueba consideramos los datos $w_0(t) := 1 - e^{-t}$ y $w_1(t) := 2 \sin(4\pi t)$.

Con estos datos la solución exacta ξ del problema inverso (5-1) viene dada por $\xi(t) := w_1(t) = 2 \sin(4\pi t)$.

Algunos de los resultados obtenidos se ilustran en la figura (5-2). Todas las figuras para este ejemplo fueron preparadas para parámetros de discretización $h = 1/100$ y $k = 1/128$.

(a) Concentración de soluto para $\alpha = 0.1$ (b) Flujo de dispersión para $\alpha = 0.1$ (c) Concentración de soluto para $\alpha = 0.5$ (d) Flujo de dispersión para $\alpha = 0.5$ (e) Concentración de soluto para $\alpha = 0.9$ (f) Flujo de dispersión para $\alpha = 0.9$ **Figura 5-2:** Soluciones para $h = 1/100$, $k = 1/128$ y $\varepsilon = 0.05$.

La tabla (5-2) contiene un listado de errores cometidos en la aproximación de la concentración de soluto molificada $J_\delta\xi$ y de el flujo de dispersión molificado $J_\delta\beta$, para perturbaciones

de $\varepsilon = 0.01$ y $\varepsilon = 0.05$ y para una variedad de parámetros de discretización h y k .

h	k	Soluto $\alpha = 0.10$	flujo $\alpha = 0.10$	Soluto $\alpha = 0.50$	Flujo $\alpha = 0.50$	Soluto $\alpha = 0.90$	Flujo $\alpha = 0.90$
$\varepsilon = 0.01$							
1/50	1/64	0.1132140	0.1435490	0.1341510	0.1578210	0.194626	0.236825
1/50	1/128	0.0463785	0.0452357	0.0709496	0.0691501	0.185966	0.274423
1/50	1/256	0.0371070	0.0289790	0.0611919	0.0536702	0.192152	0.306115
1/100	1/64	0.1782730	0.2451240	0.1858350	0.2465990	0.225890	0.296618
1/100	1/128	0.0627339	0.0808781	0.0787882	0.0987945	0.156207	0.232461
1/100	1/256	0.0398221	0.0478608	0.0540640	0.0644374	0.170127	0.269439
$\varepsilon = 0.05$							
1/50	1/64	0.1096650	0.1395740	0.1360600	0.1578350	0.326963	0.432289
1/50	1/128	0.0593921	0.0587111	0.0868429	0.0866298	0.308879	0.504957
1/50	1/256	0.0368249	0.0308536	0.0736824	0.0749152	0.255779	0.457031
1/100	1/64	0.1849470	0.2478840	0.2011460	0.2632620	0.245937	0.311235
1/100	1/128	0.0779036	0.0919977	0.0924959	0.1045700	0.204811	0.291739
1/100	1/256	0.0472762	0.0553546	0.0683365	0.0833967	0.265699	0.450748

Tabla 5-2: Errores relativos para diferentes parámetros

6 Conclusiones y trabajo futuro

6.1. Conclusiones

En esta tesis estudiamos métodos de regularización de problemas inversos lineales mal condicionados que son formulados por medio de operadores compactos en espacios de Hilbert. Tanto el método de regularización de Tikhonov como el de molificación discreta fueron implementados computacionalmente y empleados para resolver problemas inversos de conducción de calor.

Realizamos una revisión de la noción de derivada fraccionaria de Caputo y su interpretación como problema mal condicionado que exige ser regularizado cuando los datos no se conocen con exactitud. Consideramos problemas inversos mal condicionados enunciados a partir de ecuaciones de difusión con derivada temporal fraccionaria de Caputo, así como la implementación de métodos numéricos para aproximar sus soluciones.

Presentamos un esquema de diferencias finitas de marcha en el espacio, que utiliza molificación discreta como técnica de regularización, para resolver un problema inverso de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria, en el que la derivada fraccionaria es interpretada en el sentido de Caputo y los coeficientes de la ecuación son constantes.

El método es estable y la solución numérica converge a la solución molificada del problema. El procedimiento computacional es aplicado a dos problemas que ilustran la estabilidad y precisión del algoritmo propuesto. Para generar los datos requeridos por el problema inverso, introducimos un esquema implícito de diferencias finitas que aproxima las soluciones de la TFADE involucrada.

6.2. Trabajo futuro

Los problemas inversos considerados en esta tesis son planteados en un ambiente unidimensional acotado y las ecuaciones diferenciales parciales con derivadas fraccionarias (FPDE) involucradas, tienen coeficientes constantes. Una serie de temas de investigación que pueden ser considerados en un futuro para ampliar la investigación realizada son los siguientes:

- Problemas inversos para ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal

fraccionaria, en dominios espaciales semi-infinitos.

- Problemas inversos para ecuaciones de advección-dispersión lineales con derivada temporal fraccionaria, en una configuración unidimensional.
- Problemas inversos para ecuaciones de advección-dispersión con derivada temporal fraccionaria, en una configuración bidimensional.
- Problemas inversos para ecuaciones de advección-dispersión con derivada espacial fraccionaria, en una configuración bidimensional.

Bibliografía

- [1] ACOSTA, C. D. ; MEJÍA, C. E.: Stabilization of explicit methods for convection diffusion equations by discrete mollification. En: *Comput. Math. Appl.* 55 (2008), p. 368–380
- [2] ACOSTA, C. D. ; MEJÍA, C. E.: *Stable Computations by Discrete Mollification*. U. Nacional de Colombia, 2014
- [3] ACOSTA, C.D. ; AMADOR, P.A. ; MEJÍA, C.E.: Stability analysis of a finite difference scheme for a nonlinear time fractional convection diffusion equation. En: G. OLIVAR-TOST, O. V. (Ed.): *Analysis, modelling, optimization and numerical techniques. Proceedings in Mathematics and Statistics 121*. Springer, 2015
- [4] AGRAWAL, O.P.: Solution for a fractional diffusion-wave equation defined in a bounded domain. En: *J. Nonlinear Dynam.* 29 (2002), p. 145–155
- [5] AL-SHIBANI, Faoziya S. ; ISMAIL, Ahmed I M. ; ABDULLAH, Farah A.: Compact Finite Difference Methods for the Solution of One Dimensional Anomalous Sub-Diffusion Equation. En: *Gen* 18 (2013), Nr. 2, p. 104–119
- [6] BA, Carreras ; VE, Lynch ; GM., Zaslavsky: Anomalous diffusion and exit time distribution of particle tracers in plasma turbulence models. En: *Physics of Plasmas* 8 (2001), p. 5096–5103
- [7] BAKER, C. T. H.: *The Numerical Treatment of Integral Equations*. Clarendon Press, 1977
- [8] BÖCKMANN, C ; BIELE, J ; NEUBER, R: Analysis of multi-wavelength lidar data by inversion with mollifier method. En: *Pure Appl. Opt.* 7 (1998), p. 827
- [9] BREZIS, Haim: *Functional analysis, Sobolev spaces and partial differential equations*. Springer Science & Business Media, 2010
- [10] CARASSO, A.: Determining Surface Temperatures from Interior Observations. En: *SIAM J Appl Math* 42 (3) (1982), p. 558–574
- [11] CHEN, S ; LIU, Fawang: ADI-Euler and extrapolation methods for the two-dimensional fractional advection-dispersion equation. En: *Journal of Applied Mathematics and Computing* 26 (2008), Nr. 1-2, p. 295–311

- [12] CUI, Mingrong: Combined compact difference scheme for the time fractional convection–diffusion equation with variable coefficients. En: *Applied Mathematics and Computation* 246 (2014), p. 464–473
- [13] DENG ZQ, Singh V. ; L., Bengtsson: Numerical solution of fractional advection–dispersion equation. En: *Journal of Hydraulic Engineering* 130(5) (2004), p. 422–431
- [14] DIETHELM, K.: *The analysis of fractional differential equations*. Springer, 2010
- [15] DIETHELM, K. ; FREED, A.D.: On the solution of nonlinear fractional order differential equations used in the modelling of viscoplasticity, Springer Verlag, Heidelberg, 1999, p. 217–224
- [16] ERVIN, Vincent J. ; ROOP, John P.: Variational formulation for the stationary fractional advection dispersion equation. En: *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 22 (2006), Nr. 3, p. 558–576
- [17] F.MAINARDI ; PAGNINI, G.: The Wright functions as solutions of the time-fractional diffusion equation. En: *Applied Mathematics and Computation* 141 (2003), p. 51–62
- [18] GROETSCH, C. W.: *Generalized Inverses of Linear Operators*. CRC Pres, 1977
- [19] GROETSCH, C. W.: *Theory of Tikhonov Regularization for Fredholm Equations of the First Kind*. Pitman Publishing Limited, 1984
- [20] GROETSCH, C. W.: *Inverse Problems in the Mathematical Sciences*. Wiesbaden : Vieweg Verlag, 1993
- [21] HANSEN, C.: *Regularization Tools, A Matlab Package for Analysis and Solution of Discrete Ill-Posed Problems Version 4.1 for Matlab 7.3*. <http://www.imm.dtu.dk/~pch>: Department of Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, 2001
- [22] HAO, D N.: A mollification method for ill-posed problems. En: *Numer Math* 68 (1994), p. 469–506
- [23] HAO, D N.: A mollification method for a noncharacteristic Cauchy problem for a parabolic equation. En: *J Math Anal Appl* 199 (1996), p. 873–909
- [24] HAO, D N. ; REINHARDT, H J.: On a sideways parabolic equation. En: *Inverse Problems* 13 (1997), p. 297–309
- [25] HEGLAND, M. ; ANDERSSSEN, R. S.: A Mollified Framework for Improperly Posed Problems. En: *Numer. Math.* 78 (1998), p. 549–575

- [26] HUANG, F. ; LIU, F.: The fundamental solution of the space-time fractional advection-dispersion equation. En: *Appl. Math. and Comput.* 18 (2005), p. 339–350
- [27] HUANG, F. ; LIU, F.: The time fractional diffusion equation and the advection-dispersion equation. En: *ANZIAM J.* 46 (2005), p. 317–330
- [28] KARATAY, Ibrahim ; BAYRAMOGLU, Serife R.: An efficient difference scheme for time fractional advection dispersion equations. En: *Applied Mathematical Sciences* 6 (2012), Nr. 98, p. 4869–4878
- [29] KIRSCH, A.: *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*. Springer Verlag, 2011
- [30] LAVRENTEV, M. ; ROMANOV, V. G. ; M., S. P. S.: *Translations of Mathematical Monographs*. Vol. 64: *Ill-posed Problems of Mathematical Physics and Analysis*. American Mathematical Society, 1986
- [31] LI, C. ; ZENG, F.: *Numerical Methods for Fractional Calculus*. Chapman and Hall/CRC, 2015
- [32] LIU, F. ; ANH., V. ; ZHUANG, P.: Time fractional advection-dispersion equation. En: *Appl. Math. and Comput.* 13 (2003), p. 233–245
- [33] LIU, Fawang ; ZHUANG, Pinghui ; ANH, Vo ; TURNER, Ian ; BURRAGE, Kevin: Stability and convergence of the difference methods for the space-time fractional advection–diffusion equation. En: *Applied Mathematics and Computation* 191 (2007), Nr. 1, p. 12–20
- [34] LIU, Q ; LIU, Fawang ; TURNER, I ; ANH, Vo: Approximation of the Lévy–Feller advection–dispersion process by random walk and finite difference method. En: *Journal of Computational Physics* 222 (2007), Nr. 1, p. 57–70
- [35] LOUIS, A. K. ; MASS, P.: A mollifier method for linear operator equations of the first kind. En: *Inverse Problems* 6 (2000), p. 424–440
- [36] LU, XZ: Finite difference method for a time-fractional advection-dispersion equation. En: *J. Fuzhou Univ. Nat. Sci. Ed* 32 (2004), Nr. 4, p. 423–426
- [37] MAASS, P ; PIDCOCK, M K. ; SEBU, C: A mollifier method for the inverse conductivity problem. En: *Journal of Physics: Conference Series* 135 (2008), p. 012068
- [38] MAINARDI, F.: *Fractals and Fractional Calculus Continuum Mechanics*, Springer Verlag, 1997, p. 291–348
- [39] MEERSCHAERT, M. ; TADJERAN, C.: Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations. En: *J. Comput. Appl. Math.* 172 (2004), p. 65–77

-
- [40] MEJÍA, C. E. ; ACOSTA, C. D. ; SALEME, K. I.: Numerical identification of a nonlinear diffusion coefficient by discrete mollification. En: *Comput. Math. Appl.* 62 (2011), p. 2187–2199
 - [41] MEJÍA, C. E. ; MURIO, D. A.: Numerical solution of generalized IHCP by discrete mollification. En: *Computers Math. Applic.* 32 (1996), p. 33–50
 - [42] MM, Meerschaert ; C., Tadjeran: Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations. En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 172 (2004), p. 65–77
 - [43] MM, Meerschaert ; C., Tadjeran: Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations. En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 56 (2006), p. 80–90
 - [44] MM, Meerschaert ; HP., Scheffler: Finite difference methods for two-dimensional fractional dispersion equation. En: *Journal of Computational Physics* 211 (2006), p. 249–261
 - [45] MOHEBBI, Akbar ; ABBASZADEH, Mostafa: Compact finite difference scheme for the solution of time fractional advection-dispersion equation. En: *Numerical Algorithms* 63 (2013), Nr. 3, p. 431–452
 - [46] MOMANI, S. ; ODIBAT, Z.: Numerical solutions of the space-time fractional advection-dispersion equation. En: *Numer. Methods Partial Differential Equations* 24 (2008), p. 1416–1429
 - [47] MURIO, D. A.: The Mollification Method and the Numerical Solution of an Inverse Heat Conduction Problem. En: *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 2(1) (1981), p. 17–34
 - [48] MURIO, D. A.: *The Mollification Method and the Numerical Solution of Ill-Posed Problems*. John Wiley, 1993
 - [49] MURIO, D. A.: Mollification and Space Marching. En: WOODBURY, K. (Ed.): *Inverse Engineering Handbook*. CRC Press, 2002
 - [50] MURIO, D. A.: On the Stable numerical evaluation of Caputo fractional derivatives. En: *Computers Math. Applic.* 51 (2006), p. 1539–1550
 - [51] MURIO, D. A.: Time fractional IHCP with Caputo fractional derivatives. En: *Computers Math. Applic.* 56 (2008), p. 2371–2381
 - [52] MURIO, D.A.: Implicit finite difference approximation for time fractional diffusion equations. En: *Computers and Mathematics with Applications* 56 (2008), p. 1138–1145

- [53] MURIO, D.A.: Time fractional IHCP with Caputo fractional derivatives. En: *Computers and Mathematics with Applications* 56 (2008), p. 2371–2381
- [54] MURIO, D.A. ; GUO, L.: A stable space marching finite differences algorithm for the inverse heat conduction problem with no initial filtering procedure. En: *Computers Math. Applic.* 19 (1990), p. 35–50
- [55] MURIO, D.A. ; GUO, L. ; ROTH, C.: A mollified space marching finite differences algorithm for the inverse heat conduction problem with slab symmetry. En: *Computers Math. Applic.* 19 (1990), p. 75–89
- [56] MURIO, D.A. ; MEJÍA, C.E.: Generalized time fractional IHCP with Caputo fractional derivative. En: *J. Phys.: Conf. Ser.* 135 (2008), p. 012074
- [57] OLDHAM, K. B. ; SPANIER, J.: *The Fractional Calculus: Theory and Applications of Differentiation and Integration to Arbitrary Order*. Dover Publications Inc., 2002
- [58] PODLUBNY, I.: *Fractional differential equations*. Academic Press, 1999
- [59] R., HIFLER: *Applications of Fractional Calculus in Physics*. World Scientific Publishing Company: London, 2000
- [60] R, METLER ; J., KLAFTER: The random walks guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. En: *Physics Reports* 339 (2000), p. 1–77
- [61] RL, BAGLEY ; P.J., TORVIK: A theoretical basis for the application of fractional calculus to viscoelasticity. En: *Journal of Rheology* 27 (1983), p. 201–210
- [62] RL, BAGLEY ; P.J., TORVIK: On the fractional calculus model of viscoelastic behavior. En: *Journal of Rheology* 30 (1986), p. 133–155
- [63] ROOP, JOHN P.: Numerical approximation of a one-dimensional space fractional advection–dispersion equation with boundary layer. En: *Computers & Mathematics with Applications* 56 (2008), Nr. 7, p. 1808–1819
- [64] RUDIN, W.: *Real and complex analysis (3rd)*. New York: McGraw-Hill Inc, 1986
- [65] SALIM, T. O. ; EL-KAHLOUT, A.: Analytical Solution of Time-Fractional Advection Dispersion Equation. En: *Applications and Applied Mathematics: An International Journal (AAM)* 4 (2009), Nr. 1, p. 176–188
- [66] SCHUSTER, T ; QUINTO, E T.: On a Regularization Scheme for Linear Operators in Distribution Spaces with an Application to the Spherical Radon Transform. En: *SIAM J Appl Math* 65 (2005), p. 1369–1387

-
- [67] SHLESINGER MF, Klafter J.: Anomalous diffusion and exit time distribution of particle tracers in plasma turbulence models. En: *Physical Review Letters* 58 (1987), p. 1100–1103
- [68] SUNARTO, A. ; SULAIMAN, J. ; SAUDI, A.: Implicit finite difference solution for time-fractional diffusion equations using AOR method. En: *Journal of Physics: Conference Series* 495 (2014), p. 012032
- [69] SWEILAM, NH ; KHADER, MM ; MAHDY, AMS: Crank-Nicolson finite difference method for solving time-fractional diffusion equation. En: *Journal of Fractional Calculus and Applications* 2 (2012), Nr. 2, p. 1–9
- [70] VLAHOS, L. ; ISKIKER, H. ; KOMINIS, Y. ; HIZANIDIS, K. *Normal and anomalous diffusion: a tutorial*. 2008
- [71] W., Deng: Finite element method for the space and time fractional Fokker–Planck equation. En: *SIAM Journal of Numerical Analysis* 47 (2008), p. 204–226
- [72] WYSS, W.: The fractional diffusion equation. En: *Journal of Mathematical Physics* 27 (1986), p. 2782
- [73] Y, Lin ; C., Xu: Finite difference/spectral approximations for the time-fractional diffusion equation. En: *Journal of Computational Physics* 255 (2007), p. 1533–1552
- [74] ZAUDERER, E.: *Partial Differential Equations of Applied Mathematics*. Third. Wiley-Interscience, 2006
- [75] ZHANG, Y. ; SUN, Z. ; LIAO, H.: Finite difference methods for the time fractional diffusion equation on non-uniform meshes. En: *Journal of Computational Physics* 265 (2014), p. 195–210
- [76] ZHANG, Yu-xin ; DING, Hengfei: Finite difference method for solving the time fractional diffusion equation. En: *AsiaSim 2012*. Springer, 2012, p. 115–123
- [77] ZHAO, J ; LIU, S: An optimal filtering method for a time-fractional inverse advection-dispersion problem. En: *Journal of Inverse and Ill-posed Problems* (2015), p. 0928–0219
- [78] ZHENG, G H. ; WEI, T: A New Regularization Method for the Time Fractional Inverse Advection-Dispersion Problem. En: *SIAM J Appl Math* 49(5) (2011), p. 1972–1990
- [79] ZHENG, GH ; WEI, Ting: Spectral regularization method for a Cauchy problem of the time fractional advection–dispersion equation. En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 233 (2010), Nr. 10, p. 2631–2640

- [80] ZHUANG, Pinghui ; LIU, Fawang: Implicit difference approximation for the time fractional diffusion equation. En: *Journal of Applied Mathematics and Computing* 22 (2006), Nr. 3, p. 87–99